ՀԱՅ-ՌՈՒՍԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆ

ԼՐԱԲԵՐ

ՀԱՅ-ՌՈՒՍԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆԻ

ՍԵՐԻԱ

ՖԻԶԻԿԱՄԱԹԵՄԱՏԻԿԱԿԱՆ ԵՎ
ԲՆԱԿԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐ

№ 2

ՀՌՀ Հրատարակչություն

Երևան 2019

РОССИЙСКО-АРМЯНСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

В Е С Т Н И К

РОССИЙСКО-АРМЯНСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

СЕРИЯ:

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ И ЕСТЕСТВЕННЫЕ НАУКИ

№ 2

Издательство РАУ

Ереван 2019

Печатается по решению Ученого совета РАУ

Вестник РАУ, № 2. – Ер.: Изд-во РАУ, 2019. – 84 с.

Редакционная коллегия:

Главный редактор: *Казарян Э.М., академик НАН РА, д.ф.-м.н., проф.*
Зам. главного редактора: *Аветисян П.С., к.ф.-м.н., д.филос.н., проф.*
Ответственный секретарь: *Шагинян Р.С., к.х.н.*

Члены редколлегии:

Р.Г. Арамян, д.ф.-м.н., проф.; А.А. Аракелян, к.б.н., и.о. доцента; Д.Г. Асатрян, д.т.н., проф.; О.В. Бесов, член-кор. РАН, д.ф.-м.н., проф.; В.И. Буренков, д.ф.-м.н., проф.; Г.Г. Данагулян, член-кор. НАН РА, д.х.н., проф.; В.И. Муронец, д.б.н., проф.; А.А. Оганесян, к.б.н., доц.; А.О. Меликян, член-кор. НАН РА, д.ф.-м.н., проф.; В.Ш. Меликян, член-корр. НАН РА, д.т.н., проф.; Р.Л. Мелконян, д.г.-м.н, член корр. НАН РА; А.В. Папоян, член-кор. НАН РА, д.ф.-м.н., проф.; С.Г. Петросян, член-кор. НАН РА, д.ф.-м.н., проф.; А.А. Саркисян, д.ф.-м.н., проф.; А.Г. Сергеев, академик РАН, д.ф.-м.н., проф.

Журнал входит в перечень периодических изданий,
зарегистрированных ВАК РА и РИНЦ

Российско-Армянский университет, 2019 г.

ISBN 1829-0450

© Издательство РАУ, 2019

МАТЕМАТИКА

УДК: 517.518.9

Поступила: 11.02.2019г.
Сдана на рецензию: 07.03.2019г.
Подписана к печати: 29.05.2019г.

МОДИФИКАЦИЯ ФИЛЬТРА КАЛМАНА ДЛЯ ПОЛЯРНЫХ И СФЕРИЧЕСКИХ СИСТЕМ КООРДИНАТ

А.А. Дарбинян[1,2], А.Р. Акопян[1]

[1]Российско-Армянский университет
[2] Boo Visior Technologies

АННОТАЦИЯ

При измерении позиции объекта радаром возникает вопрос о точности измерения. Чтобы минимизировать ошибку измерения, используется Фильтр Калмана. Для этого необходимо, чтобы измерение было бы выполнено в Декартовых системах координат, но большинство радаров измеряют позицию в полярных или сферических системах координат и возникает вопрос о линеаризации модели измерения. Ранее для этого была использована формула Тейлора. В этой же статье будет рассмотрен метод минимизации ошибки линеаризации.

Ключевые слова: Фильтр, Калман, Полярные, Сферические, Модификация.

1. Введение

Обозначения:

$\mathbb{R}^n$ – n-мерное вещественное векторное пространство,

$C(\mathbb{X})$ – множество всех непрерывных функций на множестве $\mathbb{X} \subset \mathbb{R}^n$,
Mx и Dx – математическое ожидание и дисперсия вещественной случайной величины x,
$Cov(x, y)$ – ковариация между вещественными случайными переменными x и y,
$tr(A)$ – след квадратичной матрицы A,
A^T – транспонированная матрица A,
I – единичная матрица.

Пусть X – вектор, состоящий из n случайных величин: $X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$.

Будем обозначать его математическое ожидание и ковариационную матрицу через, соответственно,

$$M[X] \coloneqq \begin{pmatrix} Mx_1 \\ Mx_2 \\ \vdots \\ Mx_n \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad Cov[X] \coloneqq$$

$$\begin{pmatrix} Cov(x_1, x_1) & Cov(x_1, x_2) & \cdots & Cov(x_1, x_n) \\ Cov(x_2, x_1) & Cov(x_2, x_2) & \cdots & Cov(x_2, x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Cov(x_n, x_1) & Cov(x_n, x_2) & \cdots & Cov(x_n, x_n) \end{pmatrix}.$$

Постановка задачи:

Допустим, имеем некоторый движущийся объект в $\mathbb{R}^n$ с заданной моделью:

$$X_{k+1} \coloneqq F_k X_k + G_k W_k, \tag{1.1}$$

где $X_k \in \mathbb{R}^n$ k-я – позиция вектора состояния, F_k-$n \times n$ – вещественная матрица, G_k- $n \times m$ – вещественная матрица и W_k – m-мерный Гауссовский случайный вектор для которого $M[W_k] = 0$ и $Cov[W_k] = Q_k$ с каким-либо начальным состоянием X_0.

Допустим, что некоторое устройство измеряет данный объект со следующей моделью:

$$\breve{X}_k \coloneqq H_k X_k + V_k, \qquad (1.2)$$

где $\breve{X}_k \in \mathbb{R}^r$ – измерение k-той позиции, H_k – матрица размера $r \times n$ и V_k – r-мерный Гауссовский случайный вектор, для которого $M[V_k] = 0$ и $Cov[V_k] = R_k$.

Рассмотрим оценку вектора состояния на основе измерений:

$$\hat{X}_k \coloneqq \tilde{X}_k + K_k(\breve{X}_k - H_k\tilde{X}_k), \qquad (1.3)$$

где $\tilde{X}_k = F_{k-1}\hat{X}_{k-1}$, а K_k - $m \times n$ – вещественная матрица.

Теорема 1. (см. [1] или [2]) Если матрицу K_k определить формулой

$$K_k \coloneqq \tilde{P}_k H_k^T (H_k \tilde{P}_k H_k^T + R_k)^{-1},$$

где $\tilde{P}_k$ определяется рекурсивно:

$$\tilde{P}_k = Cov[X_k - \tilde{X}_k] = F_{k-1}\hat{P}_{k-1}F_{k-1}^T + G_{k-1}Q_{k-1}G_{k-1}^T,$$
$$\hat{P}_k = Cov[X_k - \hat{X}_k] = (I - K_k H_k)\tilde{P}_k,$$

тогда $tr(Cov[X_k - \hat{X}_k]) = tr(\hat{P}_k) \to min$. То есть оценка (1.3) будет оптимальной.

Как можно заметить, ковариационная матрица вектора $X_k - \tilde{X}_k = V_k$ (т.е. R_k) играет главную роль в нахождении матрицы K_k и, следовательно, в минимизации ошибки определения состояния объекта.

Замечание: Матрицы R_k и Q_k в общем случае могут быть неизвестными, тогда вопрос их оценки рассматривается отдельно.

Исследуем модели, рассмотренные в работе [4]. Пусть (см. [4]) модель движения в $\mathbb{R}^2$ описывается следующей системой уравнений.

Модель состояния

$$x_{n+1} = x_n + T\dot{x}_n + \frac{\gamma_1 T^2}{2}, \text{ где } M\gamma_1 = 0,$$

$$y_{n+1} = y_n + T\dot{y}_n + \frac{\gamma_2 T^2}{2}, \text{ где } M\gamma_2 = 0,$$

$$\dot{x}_{n+1} = \dot{x}_n + \gamma_1 T,$$

$$\dot{y}_{n+1} = \dot{y}_n + \gamma_2 T,$$

где T – время между измерениями.

А модель измерения описывается нижеприведенной системой уравнений.

Модель измерения

$$x_n = \rho_n \cos\alpha_n,$$

$$y_n = \rho_n \sin\alpha_n,$$

$$\breve{\rho}_n = \rho_n + \xi_n, \text{ где } M\xi_n = 0 \text{ и } D\xi_n = \sigma_\xi^2,$$

$$\breve{\alpha}_n = \alpha_n + \eta_n, \text{ где } M\eta_n = 0 \text{ и } D\eta_n = \sigma_\eta^2,$$

$$\breve{x}_n = \breve{\rho}_n \cos\breve{\alpha}_n = (\rho_n + \xi_n) cos(\alpha_n + \eta_n),$$

$$\breve{y}_n = \breve{\rho}_n \sin\breve{\alpha}_n = (\rho_n + \xi_n) sin(\alpha_n + \eta_n).$$

Задача заключается в линеаризации относительно $\breve{X}_n$ ξ_n и η_n. Применив формулу Тейлора, в работе [4] была получена оценка ковариационной матрицы.

$$Cov(\breve{X}_n - HX_n) \approx A_2 \begin{pmatrix} \sigma_\xi^2 & 0 \\ 0 & \rho_n^2 \sigma_\eta^2 \end{pmatrix} A_2^T, \text{ где } A_2 = \begin{pmatrix} \cos\alpha_n & -\sin\alpha_n \\ \sin\alpha_n & \cos\alpha_n \end{pmatrix}. \quad (1.4)$$

Рассмотрим модель в трехмерном случае:

Модель состояния

$$x_{n+1} = x_n + T\dot{x}_n + \frac{\gamma_1 T^2}{2}, \text{ где } M\gamma_1 = 0,$$

$$y_{n+1} = y_n + T\dot{y}_n + \frac{\gamma_2 T^2}{2}, \text{ где } M\gamma_2 = 0,$$

$$z_{n+1} = z_n + T\dot{z}_n + \frac{\gamma_3 T^2}{2}, \text{ где } M\gamma_3 = 0,$$

$$\dot{x}_{n+1} = \dot{x}_n + \gamma_1 T,$$

$$\dot{y}_{n+1} = \dot{y}_n + \gamma_2 T,$$
$$\dot{z}_{n+1} = \dot{z}_n + \gamma_3 T.$$

Модель измерений

$$x_n = \rho_n sin\alpha_n cos\varepsilon_n,$$
$$y_n = \rho_n cos\alpha_n cos\varepsilon_n,$$
$$z_n = \rho_n sin\varepsilon_n,$$
$$\breve{\rho}_n = \rho_n + \xi_n, \text{ где } M\xi_n = 0 \text{ и } D\xi_n = \sigma_\xi^2,$$
$$\breve{\alpha}_n = \alpha_n + \eta_n, \text{ где } M\eta_n = 0 \text{ и } D\eta_n = \sigma_\eta^2,$$
$$\breve{\varepsilon}_n = \varepsilon_n + \delta_n, \text{ где } M\delta_n = 0 \text{ и } D\delta_n = \sigma_\delta^2,$$
$$\breve{x}_n = \breve{\rho}_n cos\breve{\alpha}_n cos\breve{\varepsilon}_n = (\rho_n + \xi_n)cos(\alpha_n + \eta_n)cos(\varepsilon_n + \delta_n),$$
$$\breve{y}_n = \breve{\rho}_n sin\breve{\alpha}_n cos\breve{\varepsilon}_n = (\rho_n + \xi_n)sin(\alpha_n + \eta_n)cos(\varepsilon_n + \delta_n),$$
$$\breve{z}_n = \breve{\rho}_n sin\breve{\varepsilon}_n = (\rho_n + \xi_n)sin(\varepsilon_n + \delta_n).$$

Будем считать, что ξ_n, η_n и δ_n независимы.

Обозначим

$$X_n := \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \\ z_n \\ \dot{x}_n \\ \dot{y}_n \\ \dot{z}_n \end{pmatrix}, \quad \breve{X}_n := \begin{pmatrix} \breve{x}_n \\ \breve{y}_n \\ \breve{z}_n \end{pmatrix}.$$

Аналогично с двумерным случаем, в работе [4] была получена оценка:

$$Cov(\breve{X}_n - HX_n) \approx A_3 \begin{pmatrix} \sigma_\xi^2 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_n^2\sigma_\eta^2 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_n^2\sigma_\delta^2 \end{pmatrix} A_3^T, \qquad (1.5)$$

где

$$A_3 = \begin{pmatrix} \cos\alpha_n \cos\varepsilon_n & -sin\alpha_n \cos\varepsilon_n & -cos\alpha_n sin\varepsilon_n \\ \sin\alpha_n cos\varepsilon_n & \cos\alpha_n \cos\varepsilon_n & -sin\alpha_n sin\varepsilon_n \\ \sin\varepsilon_n & 0 & cos\varepsilon_n \end{pmatrix}. \qquad (1.6)$$

2. Приближение в полярных системах координат

Для $\sigma > 0$ через L_σ обозначим
$L_\sigma := \{f \quad | \quad f -$ измеримая функция и $||f||_\sigma :=$
$\sqrt{\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}(f(x))^2 e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx} < \infty\}.$

L_σ является Гильбертовым пространством с данным скалярным произведением:

$$< f, g > \ := \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)g(x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx \quad \forall f, g \in L_\sigma.$$

Так как

$$\breve{x}_n = \breve{\rho}_n \cos\breve{\alpha}_n = (\rho_n + \xi_n)cos(\alpha_n + \eta_n) = \rho_n cos(\alpha_n + \eta_n) + \xi_n cos(\alpha_n + \eta_n),$$

то наилучшее приближение для $\rho_n cos(\alpha_n + \eta_n)$ будем искать в виде $\rho_n(a_n\eta_n + b_n)$, а для $\xi_n cos(\alpha_n + \eta_n)$ в виде $c_n\xi_n$ так, чтобы при $\sigma = \sigma_\eta$.

$$D[\cos(\alpha_n + \eta_n) - a_n\eta_n - b_n] \to min,$$
$$D[\cos(\alpha_n + \eta_n) - c_n] \to min.$$

Или, что то же самое:

$$||\cos(\alpha_n + x) - a_n x - b_n||_\sigma \to min,$$
$$||\cos(\alpha_n + x) - c_n||_\sigma \to min,$$

где a_n, b_n и c_n есть вещественные числа и не зависят от ξ_n и η_n.

То есть $a_n = a_n(\alpha_n), b_n = b_n(\alpha_n), c_n = c_n(\alpha_n)$.

Таким образом, для $\breve{x}_n$ сопоставляется линейная относительно ξ_n и η_n оценка

$$\rho_n b_n + c_n\xi_n + \rho_n a_n\eta_n \ . \qquad (2.1)$$

Пусть H_n – пространство многочленов порядка, не выше чем n [3].

Пространство H_n является подпространством L_σ, таким образом, наша задача эквивалентна задаче о нахождении
$P_0(x) \coloneqq c_n \in H_0$ и $P_1(\mathrm{x}) \coloneqq a_n x + b_n \in H_1$ т.ч.

$$||cos(\alpha_n + x) - P_0(x)||_\sigma = \inf_{Q_0 \in H_0} ||cos(\alpha_n + x) - Q_0(x)||_\sigma,$$
$$||cos(\alpha_n + x) - P_1(x)||_\sigma = \inf_{Q_1 \in H_1} ||cos(\alpha_n + x) - Q_1(x)||_\sigma.$$

Так как $1 \in H_0$ базиз в H_0, а пространство L_σ – Гильбертово, то, используя метод неопределенных коэффицентов, имеем:

$$< 1, cos(\alpha_n + x) - c_n >= 0. \tag{2.2}$$

Следовательно,

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}(cos(\alpha_n + x) - c_n)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx = 0,$$
$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}cos(\alpha_n + x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx - \frac{c_n}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx = 0.$$

Так как $\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx = 1$, следовательно:

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}cos(\alpha_n + x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}(cos(\alpha_n)cos(x) - sin(\alpha_n)sin(x))e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}cos(\alpha_n)cos(x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx$$
$$- \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}sin(\alpha_n)sin(x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx$$
$$= \frac{cos(\alpha_n)}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}cos(x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx - \frac{sin(\alpha_n)}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty}sin(x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx.$$

Как можно заметить, $\int_{-\infty}^{+\infty}sin(x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx = 0$, то отсюда имеем:

$$c_n = \frac{cos(\alpha_n)}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} cos(x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx = cos(\alpha_n)e^{-\frac{\sigma^2}{2}}. \qquad (2.3)$$

Так как

$$< 1, x >= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} xe^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx = 0,$$

то функции $1, x \in H_1$ образуют ортогональный базис в H_1, следовательно, для нахождения b_n и a_n имеем:

$$< 1, cos(\alpha_n + x) - b_n >= 0, \qquad (2.4)$$

$$< x, cos(\alpha_n + x) - a_n x >= 0. \qquad (2.5)$$

В силу вышесказанного из уравнения (2.4) имеем, что

$$b_n = \cos(\alpha_n)e^{-\frac{\sigma^2}{2}}. \qquad (2.6)$$

Решим уравнение (2.5)

$$< x, cos(\alpha_n + x) - a_n x >= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} x(cos(\alpha_n + x) - a_n x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx,$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} xcos(\alpha_n + x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx - \frac{a_n}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} x^2e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx = 0.$$

Так как

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} x^2e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx = \sigma^2,$$

то

$$\sigma^2 a_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} xcos(\alpha_n + x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} xcos(\alpha_n)cos(x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx$$

$$- \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} xsin(\alpha_n)sin(x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx =$$

$$= \frac{cos(\alpha_n)}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} xcos(x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx - \frac{sin(\alpha_n)}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} xsin(x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx.$$

Так как функция $x\cos(x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$ нечетная, то $\int_{-\infty}^{+\infty} x\cos(x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx = 0$, следовательно,

$$\sigma^2 a_n = -\frac{\sin(\alpha_n)}{\sqrt{2\pi}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} x\sin(x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx.$$

Откуда

$$a_n = -\frac{\sin(\alpha_n)}{\sqrt{2\pi}\sigma^3}\int_{-\infty}^{+\infty} x\sin(x)e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}dx = -\sin(\alpha_n)e^{-\frac{\sigma^2}{2}}. \qquad (2.7)$$

Таким образом, все коэффиценты в (2.1) найдены. Поставим аналогичным образом для

$$\breve{y}_n = \breve{\rho}_n \sin\breve{\alpha}_n = (\rho_n + \xi_n)\sin(\alpha_n + \eta_n) = \rho_n\sin(\alpha_n + \eta_n) + \xi_n\sin(\alpha_n + \eta_n).$$

Найдем также наилучшие приближения для $\rho_n\sin(\alpha_n + \eta_n)$ в виде $\rho_n(\grave{a}_n\eta_n + \grave{b}_n)$ и для $\xi_n\sin(\alpha_n + \eta_n)$ в виде $\grave{c}_n\xi_n$. Таким образом, для $\breve{y}_n$ сопоставляется линейная оценка:

$$\rho_n\grave{b}_n + \grave{c}_n\xi_n + \rho_n\grave{a}_n\eta_n. \qquad (2.8)$$

Аналогично (2.2) имеем, что

$$\grave{c}_n = \sin(\alpha_n)e^{-\frac{\sigma^2}{2}}, \qquad (2.9)$$

$$\grave{b}_n = \sin(\alpha_n)e^{-\frac{\sigma^2}{2}}, \qquad (2.10)$$

$$\grave{a}_n = \cos(\alpha_n)e^{-\frac{\sigma^2}{2}}. \qquad (2.11)$$

Таким образом, мы доказали теорему.

Теорема 2. Пусть

$$x_n^* := \rho_n b_n + c_n\xi_n + \rho_n a_n\eta_n,$$

$$y_n^* := \rho_n\grave{b}_n + \grave{c}_n\xi_n + \rho_n\grave{a}_n\eta_n,$$

Тогда значения для $D[\breve{x}_n - x_n^*]$ и $D[\breve{y}_n - y_n^*]$ будут наименьшими среди линейных оценок.

Пусть

$$X_n^* := \begin{pmatrix} x_n^* \\ y_n^* \end{pmatrix} = \rho_n \begin{pmatrix} b_n \\ \grave{b}_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_n & \rho_n a_n \\ \grave{c}_n & \rho_n \grave{a}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_n \\ \eta_n \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$Cov[X_n^* - HX_n[= Cov[\rho_n \begin{pmatrix} b_n - \cos(\alpha_n) \\ \grave{b}_n - \sin(\alpha_n) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_n & \rho_n a_n \\ \grave{c}_n & \rho_n \grave{a}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_n \\ \eta_n \end{pmatrix}] =$$

$$= \begin{pmatrix} c_n & \rho_n a_n \\ \grave{c}_n & \rho_n \grave{a}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_\xi & 0 \\ 0 & \sigma_\eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_n & \rho_n a_n \\ \grave{c}_n & \rho_n \grave{a}_n \end{pmatrix}^T =$$

$$\begin{pmatrix} c_n & \rho_n a_n \\ \grave{c}_n & \rho_n \grave{a}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_\xi & 0 \\ 0 & \sigma_\eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_n & \grave{c}_n \\ \rho_n a_n & \rho_n \grave{a}_n \end{pmatrix}.$$

Следовательно,

$$Cov[X_n^* - HX_n] =$$

$$\begin{pmatrix} cos(\alpha_n)e^{-\frac{\sigma_\eta^2}{2}} & -\rho_n sin(\alpha_n)e^{-\frac{\sigma_\eta^2}{2}} \\ sin(\alpha_n)e^{-\frac{\sigma_\eta^2}{2}} & \rho_n cos(\alpha_n)e^{-\frac{\sigma_\eta^2}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_\xi^2 & 0 \\ 0 & \sigma_\eta^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} cos(\alpha_n)e^{-\frac{\sigma_\eta^2}{2}} & sin(\alpha_n)e^{-\frac{\sigma_\eta^2}{2}} \\ -\rho_n sin(\alpha_n)e^{-\frac{\sigma_\eta^2}{2}} & \rho_n cos(\alpha_n)e^{-\frac{\sigma_\eta^2}{2}} \end{pmatrix},$$

$$Cov[X_n^* - HX_n] = A_2 \begin{pmatrix} \sigma_\xi^2 e^{-\sigma_\eta^2} & 0 \\ 0 & \rho_n^2 \sigma_\eta^2 e^{-\sigma_\eta^2} \end{pmatrix} A_2^T. \quad (2.15)$$

Нетрудно заметить, что оценка (1.4) является частным случаем формулы (2.15), когда значение σ_η^2 близко к нулю.

3. Приближение в сферических системах координат

Рассмотрим пространство функций

$L_{(\sigma_1,\sigma_2)} = \{f \quad | f -$ измерима и $||f||_{(\sigma_1,\sigma_2)} :=$

$$\sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_2^2}} dy \int_{-\infty}^{+\infty} f^2(x,y) e^{-\frac{x^2}{2\sigma_1^2}} dx} < \infty\}.$$

$L_{(\sigma_1,\sigma_2)}$ является линейным пространством. Определим также скалярное произведение:

$$\forall f,g \in L_{(\sigma_1,\sigma_2)} \quad < f,g > \ :=$$
$$\frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_2^2}}dy\int_{-\infty}^{+\infty} f(x,y)g(x,y)e^{-\frac{x^2}{2\sigma_1^2}}dx,$$

Применив тот же метод вычислений, получается оптимальная линейная оценка X_n^* и следующая ковариационная матрица:

$$Cov(X_n^* - \mathrm{H}X_n) = A_3\begin{pmatrix}\sigma_\xi^2 e^{-(\sigma_\eta^2+\sigma_\delta^2)} & 0 & 0\\ 0 & \rho_n^2\sigma_\eta^2 e^{-(\sigma_\eta^2+\sigma_\delta^2)} & 0\\ 0 & 0 & \rho_n^2\sigma_\delta^2 e^{-\sigma_\delta^2}\end{pmatrix}A_3^T, \quad (3.1)$$

где

$$A_3 = \begin{pmatrix}\cos\alpha_n\cos\varepsilon_n & -sin\alpha_n\cos\varepsilon_n & -cos\alpha_n sin\varepsilon_n\\ \sin\alpha_n cos\varepsilon_n & \cos\alpha_n\cos\varepsilon_n & -sin\alpha_n sin\varepsilon_n\\ \sin\varepsilon_n & 0 & cos\varepsilon_n\end{pmatrix}$$

Нетрудно также заметить, что формула (1.5) является частным случаем формулы (3.1), когда значение $(\sigma_\eta^2 + \sigma_\delta^2)$ близко к нулю.

4. Практическое наблюдение в полярных системах координат

Ковариационные матрицы (1.4) и (2.15) были использованы при алгоритме фильтрации Кальмана на компьютерной симуляции при различных значениях σ_η.

Далее можете увидеть результат данной компьютерной симуляции, где e_1=$||\hat{X}_n - X_n||$ при использовании ковариационной матрицы (1.4), а e_2 – при использовании (2.15). Таким образом, если e_2-$e_1 > 0$, то новая ковариационная матрица выдает лучший результат и, наоборот.

Рис. 1. $\sigma_\eta = 0.01$

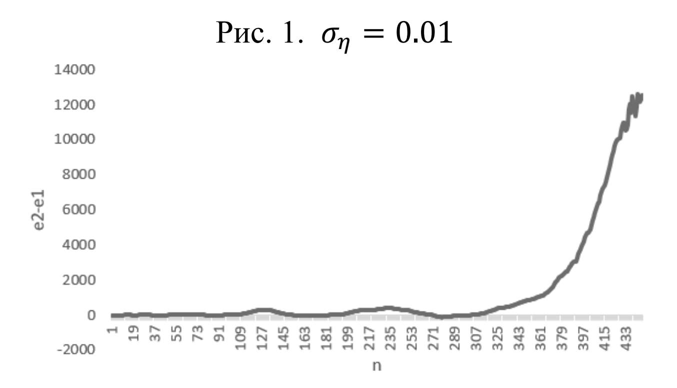


Рис. 2. $\sigma_\eta = 0.1$

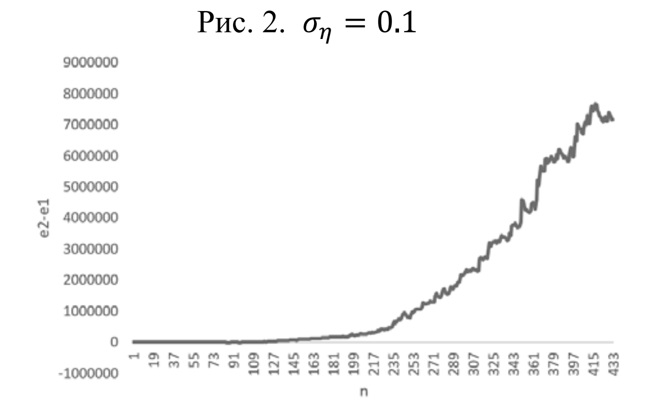
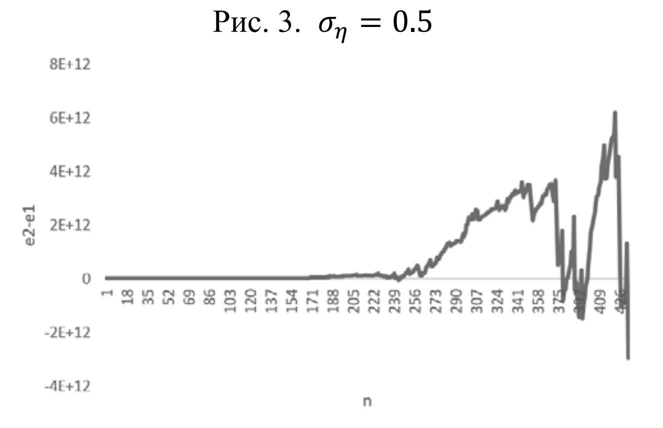


Рис. 3. $\sigma_\eta = 0.5$



Как видно из полученных результатов, новая ковариационная матрица в большинстве случаев лучше прежней.

5. Практическое наблюдение в полярных системах координат

Рис. 4. $\sigma_\eta = 0.05 \;\; \sigma_\delta = 0.05$

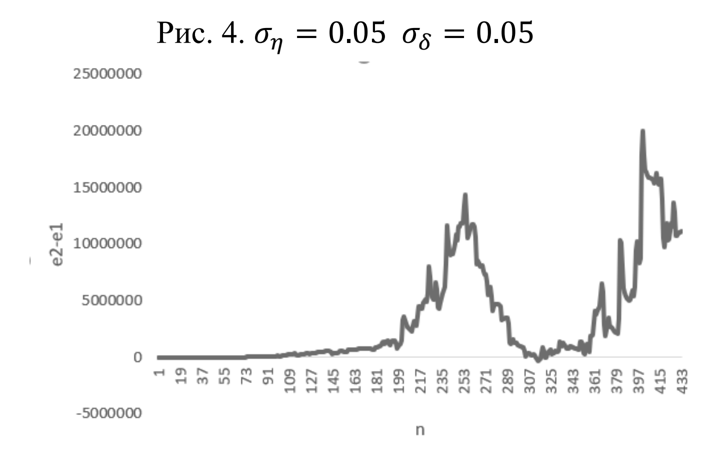


Рис. 5. $\sigma_\eta = 0.1 \;\; \sigma_\delta = 0.2$

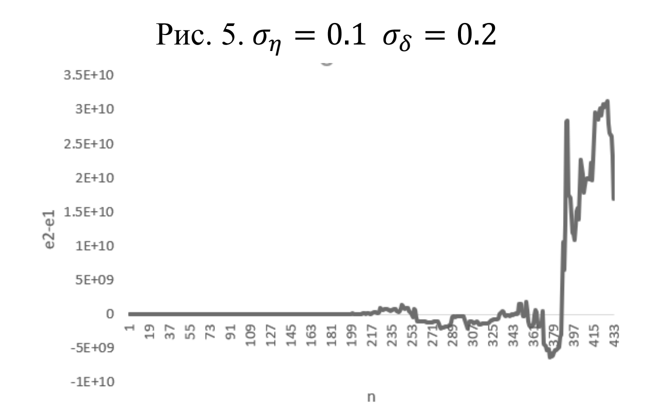
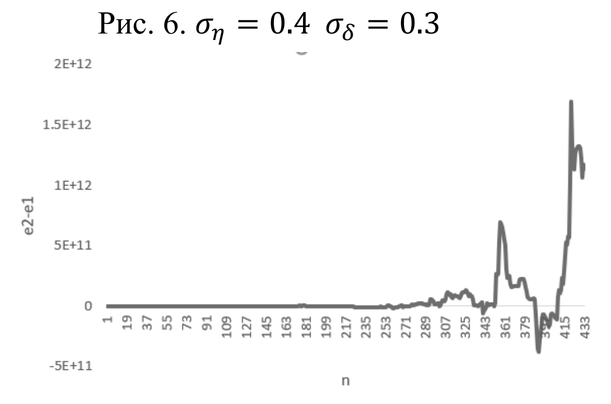


Рис. 6. $\sigma_\eta = 0.4 \;\; \sigma_\delta = 0.3$



В этом случае также видно улучшение алгоритма.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Kalman R.* A new approach to linear filtering and prediction problems. Journal of Basic Engineering. 82 (1): 35–45. doi:10.1115/1.3662552. Archived from the original (PDF) on 2008-05-29. Retrieved 2008-05-03.
2. *Kalman R., Bucy R.* New Results in Linear Filtering and Prediction Theory.
3. *Hazewinkel, Michiel* ed. Covariance matrix, Encyclopedia of Mathematics, Springer Science+Business Media B. / Kluwer Academic Publishers, ISBN 978-1-55608-010-4
4. *Ramachandra K.* Kalman Filtering Techniques for Radar Tracking. 1st Edition.

KALMAN FILTER MODIFICATION FOR POLAR AND SPHERICAL COORDINATE SYSTEMS

A. Darbinyan, A.Hakobyan

ABSTRACT

When tracking an object with a radar one can face issues with accuracy of the measurement. To minimize the error Kalman Filter can be used. In order to do that the measurement must be made in Cartesian coordinate systems, but most of the radars nowadays measure the location of the object in polar or spherical coordinate systems and one must face issues with linearizing the measurement error. Previously the Taylor series was used. In this article we will discuss another method - minimizing the variance of the error of linearization.

Keywords: Filter, Kalman, Polar, Spherical, Modification.

УДК 621.391.15 Поступила: 24.10.2019г.
Сдана на рецензию: 03.11.2019г.
Подписана к печати: 20.12.2019г.

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ИНФОРМАЦИИ В АЛГЕБРАИЧЕСКОМ КАНАЛЕ СВЯЗИ

В.К. Леонтьев[1], Г.Л. Мовсисян[2], Ж.Г. Маргарян[3]

[1]ФИЦ ИУ РАН, Москва
[2]Группа Бит, Москва
[3]Ереванский государственный университет

vkleontiev@yandex.ru, garib@hkzap.ru, j.margaryan@ysu.am

АННОТАЦИЯ

В работе введены классы эквивалентности (толерантности), которые играют определяющую роль в общей теории восстановления сообщения в Шенноновской модели передачи информации.

Ключевые слова: классы эквивалентности, толерантность, восстановление сообщения, передача информации, алгебраический канал.

Введение

Точная постановка задачи борьбы с помехами, происходящими в канале связи, принадлежит К. Шеннону и состоит в следующем: на входе канала известно некоторое множество слов, которое содержит все потенциально возможные сообщения, годные для передачи. Проблема кодирования состоит в выборе такого семейства сообщений, что при получении на выходе канала сообщения мы можем однозначно восстановить (декодировать) переданное сообщение.

§1. Каналы связи и словарные функции.

Пусть $B = \{a_1, a_2, \dots, a_p\}$ – конечный алфавит и B^* – множество всех слов конечной длины над алфавитом B. Словарная функция – это произвольное частичное отображение ψ следующего вида:

$$B^* \xrightarrow{\psi} B^*$$

Мы будем рассматривать канал как преобразователь информации, и если принять тезис о том, что в любом канале связи происходит преобразование одних слов в другие, то достаточно описать общий канал следующим образом.

Задано некоторое множество:

$$\Psi \ = \{\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_m\}$$

частичных словарных функций.

$$B^* \xrightarrow{\psi_i} B^*, i = \overline{0, m}$$

И следующее многозначное отображение:

$$f(x) = (\psi_0(x), \psi_1(x), \dots, \psi_m(x)),$$

где $x \in W \quad \subseteq B^*$. Содержательно это означает следующее. Если $x \in W$, то после передачи по каналу $K(\Psi)$ это слово переходит в одно из слов $\{\psi_0(x), \psi_1(x), \dots, \psi_m(x)\} \subseteq W$.

Множество всех обратимых отображений $\{\psi_i\}, \psi_i(a) \subseteq W$ обозначим через Т. При этом все суперпозиции $\psi_{i_1}\psi_{i_2} \dots \psi_{i_k}$ функций ψ_{i_j} из множества Ψ определены на W.

Определение [1]. Алгебраическим каналом связи $K(\Psi)$ называется следующее многозначное отображение:

$$f(x)=(\psi_0(x),\psi_1(x),\ldots,\psi_m(x)), \quad (1)$$

если для всех $\psi_i \in \Psi$, следует, что

$$\psi_i^{-1} \in \Psi \quad (2).$$

Формулу (1) следует понимать следующим образом. На вход канала подается слово. На выходе получается ровно одно из значений.

Условие (2) требует, чтобы любое «преобразованное» слово могло быть возвращено к исходному виду путем тех же самых трансформаций.

Отметим, что любой аддитивный канал удовлетворяет условию (2) и является алгебраическим. Однако это не аналогичное утверждение для матричного канала, поскольку не все матричные каналы являются алгебраическими. Например, матричный канал с выпадением символов.

В дальнейшем мы всегда будем считать, что $\psi_0(x)= x$, что можно интерпретировать как возможность безошибочной передачи слова по этому каналу, $W = B^n \subseteq B^*$

§2. Коды, исправляющие ошибки.

Определение. Множество называется кодом, исправляющим ошибки канала $K(\Psi)$, если выполнено следующее условие:

$$\psi_i(u) \neq \psi_j(v) \quad (3)$$

для всех $\boldsymbol{i}$ и $\boldsymbol{j}$ и для всех слов $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in V$.

Условие (3) означает, что последствия действий канала $K(\Psi)$ на кодовые слова различны, и поэтому ошибки могут быть обнаружены и исправлены.

В дальнейшем обозначим через $V(\Psi)$ код, исправляющий ошибки канала $K(\Psi)$. В терминах, введенных выше, основная задача при

заданном канале состоит в построении кода $V(\Psi)$ максимальной мощности $-\overline{V}\ (\Psi)$.

Ясно, что мощность кода $V(\Psi)$ зависит от «структуры» и мощности множества Ψ, «порождающего» канал $K(\Psi)$ и т.д.

Что касается выбора кода V, то здесь основное искусство состоит в правильном выборе кода, позволяющего по любому искаженному сообщению исходное однозначно восстановить. Одновременно, это, фактически, выбор необходимой избыточности в передаваемой информации для обеспечения нужной достоверности. Поскольку избыточность приводит к увеличению времени работы канала и, следовательно, к уменьшению скорости передачи информации в канале, то при принятии решения, учитывая как характеристики канала, так и способ декодирования, мы должны обеспечить баланс между необходимой достоверностью и скоростью передачи. Возможность нахождения такого баланса основывается на теореме Шенона: для определенного канала связи существуют коды со скоростью передачи меньшей пропускной способностью канала и обеспечивающие сколько угодно большую достоверность.

На сегодняшний день известно много методов декодирования: последовательный, пороговый, мажоритарный, по принципу максимального правдоподобия и т.д. В каждом случае метод выбирается в зависимости от канала и кода, а также учитывается важность, ценность, срочность передаваемой информации.

На практике применяются разработанные алгоритмы, реализующие различные модификации перечисленных методов.

Следует отметить, что задача выбора метода декодирования и алгоритма, реализующего этот метод, относится к проблематике «Исследования операций». Сама процедура исправления ошибок на выходе канала $K(\Psi)$в общем случае может быть представлена в виде следующей схемы, которую обычно называют **«таблицей декодирования»** $D(\Psi)$ или решающим правилом на приемном конце канала $K(\Psi)$. При выполнении условия (3) правило декодирования для

$V(\Psi) = \{v_0, v_1, \ldots, v_N\} \subseteq B^n$ может быть осуществлено с помощью стандартной таблицы – «таблица декодирования»:

v_0	$v_1 \ldots$	$\ldots$	v_N
$\psi_1(v_0)$	$\psi_1(v_1)$	$\ldots$	$\psi_1(v_N)$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$\psi_m(v_0)$	$\psi_m(v_1)$	$\ldots$	$\psi_m(v_N)$

Первая строка этой таблицы – это все кодовые слова. Далее, первый столбец – это все слова $\psi_0(v_0), \psi_2(v_0), \ldots, \psi_m(v_0)$. Второй столбец – $\psi_0(v_1), \psi_1(v_1), \ldots, \psi_m(v_1)$ и т.д. По определению, любое «переданное» слово каналом $K(\Psi)$ верно, которое лежит хотя бы в одном из столбцов таблицы.

Тогда кодовое слово, лежащее в первой строке любого из таких столбцов, и является «прообразом» переданного слова. Ясно, что если слово u принадлежит единственному из столбцов таблицы, то процесс «декодирования» приводит к правильному результату.

В силу условия (3) каждый элемент $\psi_i(v_s)$ может попасть лишь в один из столбцов таблицы декодирования. Поэтому процесс исправления ошибок носит очевидный характер: ищем столбец, которому принадлежит слово $\psi_i(v_s)$; первый элемент этого столбца и есть переданное сообщение. Очевидно, что каждый столбец таблицы декодирования $D(\Psi)$ – это окрестность первого порядка соответствующего кодового слова v_i, т.е. $\Psi^1(v_i) = \{\psi_0(v_i), \psi_1(v_i), \ldots, \psi_m(v_i)\}$ [5].

Замечания. В стандартных алгебраических терминах $\Psi^1(v)$ – это транзитивное множество или орбита слова v. Разница состоит в том, что множество преобразований $\Psi(x)$, вообще говоря, не является группой.

Ясно, что всегда имеет место соотношение:

$$\bigcup_{v \in V} \Psi^1(v) \subseteq B^n$$

Утверждение 1. Код V исправляет ошибки канала $K(\Psi)$ тогда и только тогда, когда столбцы таблицы декодирования не имеют общих слов.

Отметим также, что слова одного столбца таблицы декодирования не обязаны быть различными, что не влияет на способность кода V исправлять ошибки канала $K(\Psi)$.

Утверждение 2. Если имеет место $|\Psi(V)| = |\Psi| \cdot |V|$, где левая часть равенства – это мощность множества различных значений функций из Ψ на множестве V, то код V исправляет ошибки канала $K(\Psi)$.

§3. Построение кодов, исправляющих ошибки в алгебраическом канале.

Описание всего семейства кодов $\{V(\Psi)\}$, исправляющих ошибки канала $K(\Psi)$, может быть дано в терминах отношения **толерантности**.

Множество словарных функций$\{ \psi_i(x)\}$порождает на множестве B^n отношение следующего вида:

$$x \sim y \rightleftarrows \exists_{i,j}: \psi_i(x) = \psi_j(y) \qquad (4)$$

Отношение (4) является отношением толерантности на множество B^n. Оно обладает свойствами симметричности и рефлективности, но, вообще говоря, не является транзитивным.

Определение. Класс толерантности R_a, порожденный множеством словарных функций $\{\psi_i(x)\}$, и словом $a \in B^n$ – это класс слов из B^n, находящихся в отношении (4) по отношению к a или толерантных a.

Тогда получим:

$$B^n = \bigcup_{a \in B^n} R_a$$

где R_a – класс слов из B^n, толерантных a. В этом случае любой набор представителей классов толерантности образует код V, исправляющий ошибки канала $K(\Psi)$.

В терминах отношения толерантности каждый код V, исправляющий ошибки канала $K(\Psi)$, можно описать следующим образом:

Утверждение 3. Код V исправляет ошибки канала $K(\Psi)$, если и только если он содержит не более одного элемента из каждого класса толерантности R_a.

Следствие. Если код $V(\Psi)$ является максимальным для канала $K(\Psi)$, то

$$B^n = \bigcup_{a \in V(\Psi)} R_a$$

Примеры:

1) Пусть $\Psi = \{\psi_0\}$. Разобьем множество B^n на классы толерантности по следующему отношению:

$$x \sim y \rightleftarrows \psi_0(x) = \psi_0(y)$$

При этом, если взять по одному представителю из каждого класса толерантности, то мы получим максимальный по мощности код, исправляющий ошибки канала $K(\Psi)$, а мощность максимального кода равна числу различных значений, принимаемых функцией $\psi_0(x)$ на множестве B^n, то есть $(p+1)^n$.

Действительно, в этом случае таблица декодирования$D(\Psi)$имеет следующий вид:

v_0	v_1	…	v_N

Так как $v_i \neq v_j$, для всех $i \neq j$, то по значению $y = v_r$ мы однозначно восстанавливаем v_r.

2) Рассмотрим канал $\Psi = \{\psi_0, \psi_1\}$. Таблица декодирования $D(\Psi)$ имеет следующий вид:

v_0	v_1	…	v_N
$\psi_1(v_0)$	$\psi_1(v_1)$	…	$\psi_1(v_N)$

В этом случае класс толерантности R_a – это, по определению, следующее множество:

$$R_a = \{x \in B^n: x \sim a\} = \{x \in B^n: \psi_0(x) = \psi_0(a) \vee \psi_1(x) = \psi_1(a) \vee \psi_1(x) == \psi_0(a) \vee \psi_0(x) = \psi_1(a)\} .$$

Таким образом, R_a – это объединение множеств решений следующих уравнений:

$$\begin{cases}\psi_0(x) = \psi_0(a) \\ \psi_1(x) = \psi_1(a)\end{cases}, \begin{cases}\psi_0(x) = \psi_1(a) \\ \psi_1(x) = \psi_0(a)\end{cases}. \quad (5)$$

Если $B = \{0,1\}, \Psi(x) = \{\psi_0(x) = x, \psi_1(x) = \overline{x}\}$, то системы (5) приобретают следующий вид:

$$\begin{cases}x = a \\ \overline{x} = \overline{a}\end{cases}, \begin{cases}x = \overline{a} \\ \overline{x} = a\end{cases},$$

где $\overline{x}$ – логическое отрицание x.

Или $x = a, x = \overline{a}$.Поэтому $R_a = \{a, \overline{a}\}$.

Любой код V, исправляющий ошибки канала $K(\Psi)$, не должен содержать одновременно словаa и $\overline{a}$ для любого слова$a \in B^n$. Для случая $n = 2k + 1$, код $V = \left\{v, |v| \leq \frac{n-1}{2}\right\}$ имеет максимальную мощность, поскольку в этом случае

$$|\overline{v}| = n - |v| \geq \frac{n+1}{2}$$

и поэтому $\overline{v} \notin V$. С другой стороны, $|V| = 2^{n-1}$, что совпадает с верхней границей мощности при $m = 1$[5].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Леонтьев В.К., Мовсисян Г.Л.* Алгебраические каналы связи // The First International Algebraand Geometry Conference, 16 –20 may 2007.
2. *Леонтьев В.К., Мовсисян Г.Л* .Об аддитивном канале связи // Доклады АН Армении. 2004 г., Т. 104, № 1. СС. 23–27.
3. *Леонтьев В.К., Мовсисян Г.Л., Осипян А.А.* Матричные каналы связи // Материалы XI международного семинара «Дискретная математика и ее приложение». М.: Изд-во МГУ. 2012 . СС. 415–416.
4. *Левенштейн В.И.* Двоичные коды с исправлением выпадений, вставок и замещения символов. ДАН. СССР. 1965, 163. 4. СС. 845–848.
5. *Леонтьев В.К., Мовсисян Г.Л., Маргарян Н.Г.* Верхняя и нижняя границы мощности кода исправляющего ошибки алгебраического канала // Доклады АН Армении, 2020. № 2.

RESTORATION OF INFORMATION INANAL GEBRAIC COMMUNICATION CHANNEL

V. Leont'ev, G. Movsisyan, J. Margaryan

ABSTRACT

In the present work, equivalence (tolerance) classes are introduced, which play a crucial role in the general theory of message restoration in the Shannon model of information transfer.

Keywords: equivalence classes, tolerance, restoration of messages, information transfer, and algebraic channel.

УДК 519 .17

Поступила: 11.12.2019г.
Сдана на рецензию: 19.12.2019г.
Подписана к печати: 20.12.2019г.

ON THE ACHROMATIC INDEX OF GRAPHS WITH A SPANNING STAR

N. Hovsepyan

Russian-Armenian University

narek.hovsepyan@student.rau.am

ABSTRACT

A proper edge-coloring of a graph G is a mapping $\alpha: E(G) \rightarrow N$, such that $\alpha(e) \neq \alpha(e')$ for every pair of adjacent edges $e, e' \in E(G)$. A proper edge-coloring of a graph G with colors $1, \ldots, t$ is called a complete t-edge-coloring if for every pair of colors i and j, there are two edges with a common vertex, one colored by i and the other colored by j. The largest value of t for which G has a complete t-edge-coloring is called the achromatic index $\psi'(G)$ of G. In this paper, we study the achromatic index of graphs with a spanning star. In particular, we derive a lower bound on the achromatic index of some graphs which are constructed by joining n copies of any graph H with a spanning star at a shared universal vertex which is connected to all vertices of copies of H.

Keywords: Achromatic number, achromatic index, complete edge-coloring, graph with a spanning star, windmill graph.

1. Introduction

All graphs considered in this paper are finite, undirected, and have no loops or multiple edges. Let $V(G)$ and $E(G)$ denote the sets of vertices and

edges of a graph G, respectively. The maximum degree of vertices in G is denoted by $\Delta(G)$, the chromatic number of G by $\chi(G)$ and the chromatic index of G by $\chi'(G)$. We use the standard notations K_n for the complete graph on n vertices. The terms and concepts that we do not define can be found in [3,7,13].

A proper t-vertex-coloring of a graph G is a mapping $\alpha: V(G) \to \{1,\dots,t\}$, such that for any $uv \in E(G)$, $\alpha(u) \neq \alpha(v)$. The chromatic number $\chi(G)$ of a graph G is the smallest value of t for which it has a proper t-vertex-coloring. A proper t-vertex-coloring of a graph G is a complete t-vertex-coloring of a graph G if for every pair of colors i and j, there is an edge uv, such that $\alpha(u) = i$ and $\alpha(v) = j$. The achromatic number $\psi(G)$ of G is the largest value of t for which G has a complete t-vertex-coloring. The achromatic number of graphs was introduced by Harary and Hedetniemi in [8]. In [9], Harary, Hedetniemi and Prins showed that for any graph G if $\chi(G) \leq t \leq \psi(G)$, then G has a complete t-vertex-coloring. In general, it is known that the problem of determining of the achromatic number is NP-complete for bipartite graphs, cographs, interval graphs, and even for trees [1, 6, 12].

A proper edge-coloring of a graph G is a mapping $\alpha: E(G) \to \{1,\dots,t\}$, such that $\alpha(e) \neq \alpha(e')$ for every pair of adjacent edges $e, e' \in E(G)$. A proper edge-coloring of a graph G with colors $1,\dots,t$ is called a complete t-edge-coloring, if for every pair of colors i and j, there are two edges with a common vertex, one colored by i and the other colored by j. The largest value of t for which G has a complete t-edge-coloring is called the achromatic index $\psi'(G)$ of G. The problem of determination of the achromatic index of the complete graph K_n was first considered by Bouchet [2], who proved that there is an intimate connection between this parameter and the existence of finite projective planes.

Theorem 1. If q is odd and $n = q^2 + q + 1$, then $\psi'(K_n) = qn$ if and only if a finite projective plane of order q exists. Moreover, if $\psi'(K_n) = qn$, then the vertices covered by each color class in any complete $\psi'(K_n)$-

edge-coloring form the lines of a finite projective plane with the vertices of K_n as points.

The achromatic index of complete graphs was also considered by Jamison [11]. In [11], the author obtained some lower and upper bounds for the achromatic index of complete graphs. He also showed that if $n > 4$, then $\psi'(K_{n+2}) \geq \psi'(K_n) + 2$. Moreover, Jamison [11] showed that the achromatic index of complete graphs $\psi'(K_n)$ grows asymptotically like $n^{\frac{3}{2}}$. The achromatic index of complete bipartite graphs was first considered by Chiang and Fu [4]. In [4], the authors obtained lower and upper bounds for the achromatic index of complete bipartite graphs. The achromatic index of complete bipartite graphs was also considered by Hovsepyan and Petrosyan [10]. In particular, the authors proved that the following lower bound: $\psi'(K_{m+n+1}) \geq \psi'(K_{m,n}) + m + n - 1$. In [5], the achromatic indices of regular complete multipartite graphs were investigated.

In the present paper, we study the achromatic index of some graphs with a spanning star. In particular, we consider graphs which are constructed by joining n copies of any graph H with spanning star at a shared universal vertex which is connected to all vertices of copies of H.

2. The main result

In this section we consider complete edge-colorings of graphs with a spanning star. We also consider a special class of such graphs which is called windmill graph. The windmill graph $Wd(k,n)$ is a graph constructed for $k \geq 2$ and $n \geq 2$ by joining n copies of the complete graph K_k at a shared universal vertex. It is a 1-clique-sum of these complete graphs. Figure 1 shows graph which is constructed by joining four copies of K_5 at a shared vertex, which is the same as $(5,4)$.

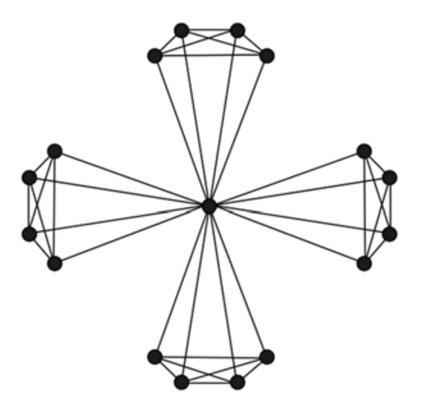


Figure 1. The Windmill graph Wd (5,4).

Theorem 2. If G is a graph constructed by joining n copies ($n \geq 2$) of a graph H with a spanning star at a shared universal vertex which is connected to all vertices of copies of H, then

$$\psi'(G) \geq \psi'(H) + (n-1) \cdot \Delta(H).$$

Proof. Let v_0 denote the universal vertex, which is connected to the rest of the vertices in graph G and H^i denote i-th copy of the graph H in G.

First, we color the edges of a graph H^1 with complete edge-coloring using $\{1, \dots, \psi'(H)\}$ colors. We may assume that the edges incident to $v_0, e \in E(H^1)$ are colored with $\{1, \dots, \Delta(H)\}$ colors. Then we need to color other copies of H. We will color H^2 with the same coloring strategy, but replacing $\{1, \dots, \Delta(H)\}$ colors with new colors in the color set $\{1, \dots, \psi'(H)\}$. The coloring is proper as at the only shared vertex v_0, the edges incident to $v_0, e \in E(H^1)$ edges are colored with $\{1, \dots, \Delta(H)\}$ colors, the edges incident to $v_0, e \in E(H^2)$ are colored with new replaced colors. We can repeat this operation and color the rest of H copies. As we showed, the coloring is proper. For every H^i, we are using the same color set with new $\Delta(H)$ colors, which means number of colors used in G is $\psi'(H) + (n-1) \cdot \Delta(H)$. Let us show that the mentioned coloring is complete. The coloring of every H^i is complete and $\{1, \dots, \Delta(H)\}$ colors with their replacements for copies are used to color also edges incident to $v_0, e \in E(G)$, which means for every pair of colors i and j, there are two

edges with common vertex v_0, one colored by i and the other colored by j. This proves the lower bound.

Corollary. For any $k \geq 2$ and $n \geq 2$,

$$Wd(k,n) \geq \psi'(K_k) + (n-1) \cdot (k-1).$$

REFERENCES

1. *Bodlaender H.* Achromatic number is NP-complete for cographs and interval graphs, Inform. Proc. Lett. 31. PP. 135–138, 1989.
2. *Bouchet A.* Indice achromatique des graphes multiparti complets et reguliers, Cahiers Centre d'Etudes et Recherche Operationnelli 20 (3–4). PP. 331–340, 1978.
3. *Chartrand G., Zhang P.* Chromatic Graph Theory, Discrete Mathematics and Its Applications, CRC Press, 2009.
4. *Chiang N.-P., Fu H.-L.* On the achromatic number of the Cartesian product $G_1 \times G_2$, Australasian Journal of Combinatorics 6. PP. 111–117, 1992.
5. *Chiang N.-P., Fu H.-L.* The achromatic indices of the regular complete multipartite graphs, Discrete Math. 141, PP. 61–66, 1995.
6. *Farber M., Hahn G., Hell P., Miller D.* Concerning the achromatic number of graphs // Journal of Combin. Theory, Ser. B 40, PP. 21–39, 1986.
7. *Harary F.,* Graph Theory, Addison-Wesley, Reading, MA, 1969.
8. *Harary F., Hedetniemi S.T.* The achromatic number of a graph // Journal of Combin. Theory, Ser. B 8. PP. 154–161, 1970.
9. *Harary F., Hedetniemi S.T., Prins G.* An interpolation theorem for graphical homomorphisms, Portug. Math. 26, PP. 453–462, 1967.
10. *Hovsepyan N.H., Petrosyan P.A.* On the achromatic index of complete graphs, Proceedings of the CSIT Conference, Yerevan. PP. 200–202, 2017.
11. *Jamison R.E.* On the edge achromatic numbers of complete graphs, Discrete Math. 74. PP. 99–115, 1989.
12. *Manlove D., McDiarmid C.* The complexity of harmonious coloring for trees, Discrete Appl. Math.57, PP. 133–144, 1995.
13. *West D.B.* Introduction to Graph Theory, Prentice-Hall, New Jersey, 2001.

ОБ АХРОМАТИЧЕСКОМ ИНДЕКСЕ ГРАФОВ С ОСТОВНОЙ ЗВЕЗДОЙ

Н. Овсепян

АННОТАЦИЯ

Функция $\alpha: E(G) \rightarrow N$ называется правильной реберной раскраской графа G, если для каждой пары соседних ребер $e, e' \in E(G)$, $\alpha(e) \neq \alpha(e')$. Правильная реберная раскраска графа G в цвета $1, \ldots, t$ называется полной реберной t-раскраской графа G, если для каждой пары цветов i, j существуют два соседних ребра, одно из которых окрашено в i-ый цвет, а другое – в j-ый цвет. Наибольшее значение t для которого G имеет полную реберную t-раскраску называется «ахроматическим индексом» и обозначается через $\psi'(G)$. В настоящей работе мы получили нижнюю оценку ахроматического индекса для некоторых графов с остовной звездой.

Ключевые слова: ахроматический номер, ахроматический индекс, правильная реберная раскраска, граф с остовной звездой.

УДК 510.64 Поступила: 03.12.2019г.
Сдана на рецензию: 09.12.2019г.
Подписана к печати: 12.12.2019г.

О НЕКОТОРЫХ СВОЙСТВАХ ПРОПОЗИЦИОНАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ ОБОБЩЕННЫХ РАСЩЕПЛЕНИЙ

А. Чубарян[1,2], С. Ованисян[1], Г. Гаспарян[1]

[1]Ереванский государственный университет
[2]Российско-Армянский университет

achubaryan@ysu.am, saqohovhannisyan0199@gmail.com, haykgasparyan012@gmail.com

АННОТАЦИЯ

Для некоторых семейств формул сравнены основные сложностные характеристики выводов (количество шагов и длина) в «слабой» пропозициональной системе выводов, основанной на обобщении метода расщепления, и в одной из «сильных» систем – системе Фреге. Для одного из классов формул первая система оказалась лучшей для обеих сложностных характеристик, для другого класса – вторая система, что указывает на факт несравнимости этой пары систем.

Ключевые слова: обобщенный метод расщепления, системы Фреге, длина и количество шагов вывода, сводимость систем.

1. Введение

Теория сложностей выводов изучает количественные характеристики выводов, то есть насколько «просто» или «сложно» может быть доказана та или иная теорема. Толчком для бурного развития те-

ории сложностей пропозициональных выводов явился известный результат Кука и Рекхау о неравенстве множеств NP и $coNP$, в том и только том случае, если не существует полиномиально ограниченной системы доказательств классических тавтологий [1]. За годы интенсивных исследований получено множество интересных оценок длины (*l-сложности*) и количества шагов (*t-сложности*) выводов в различных системах классического исчисления высказываний (КИВ), на основе которых выстроена некая иерархия пропозициональных систем выводов. Некоторые из них с относительно простой стратегией поиска выводов, условно определены как «слабые» системы – системы, в которых для отдельных классов формул получены нижние экспоненциальные оценки длин выводов, а те системы, в которых ни для какого класса таковых оценок пока не найдено, считаются «сильными». К первому множеству относится, в частности, система, основанная на обобщенном методе расщеплений $\boldsymbol{OP}$, определенная в [2], ко второму классу относятся наиболее естественные системы выводов – системы Фреге $\mathcal{F}$. В настоящей работе выявлено некое несоответствие между характеристиками «слабый-сильный» соотношениями названных систем: для одного из классов формул первая система оказалась лучшей для обеих сложностных характеристик, для другого класса – вторая система, что указывает на факт несравнимости этой пары систем.

2. Предварительные понятия. Для доказательства основного результата напомним некоторые понятия и обозначения. Мы будем пользоваться общепринятыми понятиями единичного n-мерного булева куба (E^n), пропозициональной формулы, тавтологии, системы доказательства КИВ.

Конкретный выбор языка для представления пропозициональной формулы (а значит, и системы доказательств) не имеет значения для наших рассмотрений, однако из технических соображений мы предполагаем, что он содержит пропозициональные переменные p_i ($i \geq 1$) и (или) p_{i_j} ($i \geq 1$, $j \geq 1$), логические связки $\neg$, &, $\vee$, $\supset$ и пару скобок (,).

Длина формулы φ, определяемая как количество всех вхождений в нее логических связок, обозначается через $|\varphi|$. Очевидно, что линейной функцией от $|\varphi|$ оценивается и полная длина формулы, понимаемая как количество всех символов.

Следуя общепринятой терминологии, *литералом* будем называть переменную или ее отрицание. Конъюнкт K может быть представлен как множество литералов, причем это множество не может содержать переменную и ее отрицание одновременно.

В работе [4] введены следующие понятия. Для произвольной пропозициональной формулы ψ следующие тривиальные эквивалентности назовем *правилами замещения*:

$0 \,\&\, \psi = 0,$	$\psi \,\&\, 0 = 0,$	$1 \,\&\, \psi = \psi,$	$\psi \,\&\, 1 = \psi,$
$0 \lor \psi = \psi,$	$\psi \lor 0 = \psi,$	$1 \lor \psi = 1,$	$\psi \lor 1 = 1,$
$0 \supset \psi = 1,$	$\psi \supset 0 = \bar{\psi},$	$1 \supset \psi = \psi,$	$\psi \supset 1 = 1,$
$\bar{0} = 1,$	$\bar{1} = 0,$	$\bar{\bar{\psi}} = \psi,$	
$0 \equiv \psi = \bar{\psi},$	$\psi \equiv 0 = \bar{\psi},$	$1 \equiv \psi = \psi,$	$\psi \equiv 1 = \psi.$

Применение правил замещения к некоторому слову заключается в замене какого-либо его подслова, имеющего вид левой части одного из указанных эквивалентностей, правой частью.

Отметим также, что функция $p^{б}$ определяется общепринятым образом: p^0 есть $\neg p$, а p^1 есть p.

2.1. Определения рассматриваемых систем

Согласно [1], каждая система Фреге $\mathcal{F}$ использует перечислимое множество пропозициональных переменных, конечное, функционально полное множество логических связок; $\mathcal{F}$ имеет конечное множество правил вывода, определяемых для формул $A_1, A_2, \ldots, A_m$ и B в виде $\frac{A_1 A_2 \ldots A_m}{B}$ (правила вывода, количество посылок которых равно нулю, считаются аксиомами); система $\mathcal{F}$ должна быть непротиворечивой и

полной, т.е. если при некотором значении переменных все формулы $A_1, A_2, \ldots, A_m$ истинны, то и B должно быть истинным, и все тавтологии должны быть выводимы.

Система обобщенных расщеплений была описана в [2]. Обобщенный метод расщеплений (о.м.р.), введенный на основе метода расщеплений, описанного в [3] только для дизъюнктивных нормальных форм (д.н.ф.), позволяет каждой формуле φ сопоставить некоторое помеченное бинарное дерево расщепления (д.р.), корню которого приписана сама формула φ, конечным узлам приписаны значения 0 или 1, а сыновьям каждого узла v, которому приписана некоторая формула φ_v, приписаны результаты расщепления φ_v по некоторой переменной p, входящей в φ_v следующим образом:

1) при расщеплении тавтологии φ_v по литералу α делаем пометку α на ребре, ведущем от узла с пометкой φ_v к узлу с пометкой $\varphi_v\,[\alpha]$,

2) сама формула $\varphi_v\,[\alpha]$ строится по φ_v следующим образом: если $\alpha = p (\alpha = \bar{p})$, то всюду в φ_v вместо переменной p подставляем значение 1(0) и применяем правила замещения или до получения формулы, не содержащей константы, или до получения константы.

Естественно, что, меняя порядок переменных, по которым производится расщепление, можно получать различные д.р. Очевидно также, что тавтологиям соответствуют деревья, конечным узлам которых приписаны только единицы.

Соответствующая система, основанная на о.м.р. с одной аксиомой-тавтологией – 1 и одним правилом вывода $\varphi[p], \varphi[\bar{p}] \vdash \varphi$,обозначена через $\boldsymbol{OP}$.

2.2. Сложностные характеристики выводов

Основными сложностными характеристиками выводов являются: t – сложность, определяемая как количество различных формул в выводе, и l – сложность, определяемая как сумма длин всех различных формул в выводе [2]. Пусть ф является некоторой системой выводов,

а φ – некоторая тавтология. Через t_{φ}^{ϕ} (l_{φ}^{ϕ}) обозначим минимально возможное значение *t*-сложности (*l-сложности*) всевозможных выводов тавтологии φ в системе ϕ. Следующие понятия введены в [1].

Пусть Φ_1 и Φ_2 произвольные пропозициональные системы.

Определение 2.2.1. Система Φ_1 *p-l-имитирует (p-t-имитирует)* систему Φ_2 если существует такой полином *p()*, что для любой формулы φ, выводимой в обоих системах Φ_1 и Φ_2, имеет место $l_{\varphi}^{\Phi1} \leq p(l_{\varphi}^{\Phi2})$ ($t_{\varphi}^{\Phi1} \leq p(t_{\varphi}^{\Phi2})$).

Определение 2.2.2. Системы Φ_1 и Φ_2 *p-l – эквивалентны (p-t – эквивалентны)*, если каждая из систем Φ_1 и Φ_2 *p-l – имитирует (p-t – имитирует)* другую.

Далее будут получены верхние и нижние оценки указанных сложностных характеристик выводов и для их записи будут использованы следующие общепринятые обозначения:
если $\exists c_1 \exists k_1\ \forall x > k_1 |f(x)| \geq c_1 |g(x)|$, то мы будем писать $f(x) = \Omega(g(x))$,
если $\exists c_2 \exists k_2\ \forall x > k_2 |f(x)| \leq c_2 |g(x)|$, то мы будем писать $f(x) = O\big(g(x)\big)$.

При выполнении этих обеих условий будем писать $f(x) = \Theta(g(x))$.

2.3. Важные формулы

В наших рассмотрениях важную роль играют тавтологии

$$\boldsymbol{TTM_{n,m}} = \bigvee_{(\sigma_1,\ldots,\sigma_n)\in E^n} \mathop{\&}_{j=1}^{m} \bigvee_{i=1}^{n} p_{i_j}^{\sigma_i} (n \geq 1, 1 \leq m \leq 2^n - 1),$$

которые при каждых фиксированных $n \geq 1$ и m из указанных интервалов «выражают» следующее истинное утверждение: **в каждой 0, 1-матрице размера $\boldsymbol{n \times m}$ можно так «перевернуть» строки (заменить 0 на 1 и 1 на 0), чтобы в каждом столбце была по крайней мере одна единица.** Отметим, что $\left|TTM_{n,m}\right| = n2^n m$.

Второй класс рассматриваемых формул – совершенные д.н.ф. тавтологий

$$\boldsymbol{DNF_n} = \bigvee_{(\sigma_1,\dots,\sigma_n)\in E^n} \mathop{\&}_{i=1}^{n} p_i^{\sigma_i} \ (n \geq 1).$$

Отметим, что $|\boldsymbol{DNFn}| = (n+1)2^n - 2$.

3.Основные результаты.

Здесь сначала будут даны оценки шагов и длин выводов формул $\boldsymbol{DNF_n}$ в системах $\boldsymbol{\mathcal{F}}$ и $\boldsymbol{OP}$**,** затем будут приведены оценки тех же сложностных характеристик в тех же системах для формул $\boldsymbol{TTM_{n,2^n-1}}$, и далее будет дан сравнительный анализ полученных результатов.

Теорема 1.

$$t_{\boldsymbol{DNFn}}^{\mathrm{OP}} = \Theta(n) \text{ и } l_{\boldsymbol{DNFn}}^{\mathrm{OP}} = \mathrm{O}(n2^n),$$
$$t_{\boldsymbol{DNFn}}^{\mathcal{F}} = \Omega(2^n) \text{ и } l_{\boldsymbol{DNFn}}^{\mathcal{F}} = \Omega((2^n)^2).$$

Для доказательства теоремы предварительно сделаем несколько замечаний о возможностях построения дерева расщепления, основываясь на о.м.р. для

$$\boldsymbol{DNF_n} = \bigvee_{(\sigma_1,\dots,\sigma_n)\in E^n} \mathop{\&}_{i=1}^{n} p_i^{\sigma_i} \ (n \geq 1).$$

В силу «симметричного» расположения переменных в этих формулах порядок выбора переменных, по которым будет производиться расщепление, не важен.

Произведем расщепление по переменным $p_n, p_{n-1}, \dots, p_1$ поочередно на каждом уровне. Рассмотрим, какие формулы получаются при расщеплении формулы $\boldsymbol{DNF_n}$ по вышеуказанным переменным. На первом уровне дерева, естественно, находится сама формула $\boldsymbol{DNF_n}$, на втором – две формулы $\boldsymbol{DNF_{n-1}}$**,** на третьем – четыре формулы $\boldsymbol{DNF_{n-2}}$**,** на предпоследнем уровне будут формулы $p_1 \vee \neg p_1$, а на последнем – одни единицы. Нетрудно заметить, что среди вышеперечисленных формулах ровно $n+1$, отличных друг от друга. а значит $t_{\boldsymbol{DNFn}}^{\mathrm{OP}} = \Theta(n)$. Сумма длин всех различных формул в этом выводе равна:

$$(n+1)2^n - 2 + n2^{n-1} - 2 + \cdots + 3(2^2) - 2 + 2(2^1) - 2 =$$
$$(n-1)2^{n+1} + 2 + 2^{n+1} - 2 - 2n = 2n(2^n - 1) \le 2n2^n,$$

следовательно, $l^{\mathrm{OP}}_{\boldsymbol{DNFn}} = \mathrm{O}(n2^n)$.

Для оценок сложностных характеристик в системах Фреге напомним понятие существенной подформулы тавтологии [4]. Подформула β тавтологии φ является существенной, если результат ее повсеместной замены на переменную, не входящую в φ, не является тавтологией. Там же обосновано, что если количество различных существенных подформул тавтологии есть k, то $t^{\mathcal{F}}_{\varphi} = \Omega(k)$ и $l^{\mathcal{F}}_{\varphi} = \Omega(k^2)$. Если в каждом конъюнкте формулы $\boldsymbol{DNF_n}$ расставить скобки, спаривая литералы справа налево, а сами конъюнкты также спаривать справа налево, то не трудно убедиться, что для каждого n количество различных существенных подформул в $\boldsymbol{DNF_n}$ равно:

$$\mathrm{n} + 2^2 + 2^3 + \ldots + 2^n + 2^n - 1 \ge 3(2^n),$$

откуда следует, что $t^{\mathcal{F}}_{\boldsymbol{DNFn}} = \Omega(2^n)$ и $l^{\mathcal{F}}_{\boldsymbol{DNFn}} = \Omega((2^n)^2)$.

Напомним, что в [4] доказано, что для некоторого полинома *p()*

$$t^{\mathcal{F}}_{\boldsymbol{TTM}_{\boldsymbol{n},2^n-1}} \le l^{\mathcal{F}}_{\boldsymbol{TTM}_{\boldsymbol{n},2^n-1}} \le p\left(\left|TTM_{n,2^n-1}\right|\right),$$

а в [2] доказано, что при произвольном достаточно большом n и $\forall i(1 \le i < [n \log_n 2])$ для формул $\varphi^i_n = TTM_{n,n^i}$ имеет место:

$$\log_2 t^{\mathcal{F}}_{\varphi^i_n} = \Omega\left(n^i\right) \text{ и } \log_2 l^{\mathcal{F}}_{\varphi^i_n} = \Omega\left(n^i\right).$$

Сравнивая эти оценки с результатами Теоремы 1, получаем следующее утверждение.

Теорема 2. Системы $\mathcal{F}$ и $\boldsymbol{OP}$ несравнимы по шагам выводов.

Действительно, система $\mathcal{F}$ имеет экспоненциальное ускорение шагов формулы $TTM_{n,2^n-1}$ по сравнению с количеством шагов выводов той же формулы в системе $\boldsymbol{OP}$, и наоборот: система $\boldsymbol{OP}$ имеет экспоненциальное ускорение шагов формулы $\boldsymbol{DNF_n}$ по сравнению с количеством шагов выводов той же формулы в системе $\mathcal{F}$.

Интересно провести исследования по сравнению количества шагов одних и тех же формул в системе $\boldsymbol{OP}$ и ряде других известных пропозициональных систем с целью построения быть может новой иерархии по шагам выводов.

Исследование данной статьи выполнено при финансовой поддержке Государственного комитета по науке МОН РА в рамках научного проекта № 18T-1B034.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Cook S., Reckhow A.* The relative efficiency of propositional proof systems, Journal of Symbolic Logic, vol. 44, 1979. CC. 36–50.
2. *Чубарян А.А., Чубарян А.А.* Оценки некоторых сложностных характеристик выводов в системе обобщенных расщеплений, НАУ, Отечественная наука в эпоху изменений: постулаты прошлого и теории нового времени, часть 10, 2 (7), 2015. CC. 11–14.
3. *Данцин Е.Я.* Две системы доказательства тавтологичности, основанные на методе расщепления // Зап.научн.семинар. ЛОМИ АН СССР, 1980. CC. 24–44.
4. *Aleksanyan S. and Chubaryan An.* The polynomial bounds of proof complexity in Frege systems, *Siberian Mathematical Journal*, Vol. 50, No. 2, 2009. PP. 243–249.

ON SOME PROPERTIES OF PROPOSICIONAL SYSTEM BASED ON GENERALIZATION OF SPLITTING METHOD

A. Chubaryan, S. Hovhanisyan, H. Gasparyan

ABSTRACT

The main proof complexity characteristics (number of steps and sizes) are comparisen for two classes of formulas in “weak” propositional proof system, based on generalization of splitting method, and in one of “strong” systems – Frege systems. The first system is better by both complexity characteristics for one of considered formula classes, just as the second system is better for the other classes.

Kaywords: generalising splitting method; Frege systems; size and number of proof steps; simulation of systems.

УДК 519.17 Поступила: 13.12.2019г.
Сдана на рецензию: 19.12.2019г.
Подписана к печати: 10.12.2019г.

ON NEAR-INTERVAL COLORINGS OF SOME BIPARTITE GRAPHS

G. Matevosyan

Russian-Armenian University

gor.matevosyan@rau.am

ABSTRACT

A proper edge-coloring α of a graph G with colors $1, 2, \ldots, t$ is called a near-interval t-coloring (interval $(t, 1)$-coloring) if all colors are used and the colors of edges incident to each vertex $v \in V(G)$ satisfy the condition $d_G(v) - 1 \leq \max\big(S(v, \alpha)\big) - \min(S(v, \alpha)) \leq d_G(v)$, where $d_G(v)$ is the degree of the vertex v, and $S(v, \alpha)$ is the set of colors of edges incident to v. We prove that all bipartite multigraphs with $\Delta(G) = 2r$ $(r \geq 2)$ and vertex degrees $d_G(v) \in \{1, 2, 2r-1, 2r\}$ have an interval $(2r, 1)$-coloring. We also prove that every bipartite graph with bipartition (U, V) where for every $u \in U, d_G(u) = 6$ and for every $v \in V, d_G(v) \in \{1,2,4,5,6\}$ has an interval (7,1)-coloring.

Keywords: interval coloring, near-interval coloring, interval $(t, 1)$-coloring, bipartite graph.

1. Introduction

We use [11] for terminology and notation not defined here. All graphs considered are finite, undirected, allow multiple edges, and contain no loops, unless otherwise stated. A simple graph is a graph with no multiple edges and loops. Let $V(G)$ and $E(G)$ denote the sets of vertices and edges

of a graph G, respectively. The degree of a vertex $v \in V(G)$is the number of edges that are incident to the v, and in a multigraph, loops are counted twice. The degree of a vertex v is denoted by $d_G(v)$, and the maximum degree of G by $\Delta(G)$.

A *proper t-edge-coloring* of a graph is a mapping $\alpha: E(G) \rightarrow \{1, 2, \dots, t\}$, such that $\alpha(e) \neq \alpha(e')$ for every pair of adjacent pairs e and e'. If α is a proper edge-coloring of G and $v \in V(G)$, then $S(v, \alpha)$(spectrum of the vertex v) denotes the set of colors of edges incident to v. An *interval* $(t, 1)$*-coloring (near-interval* t*-coloring)* of a graph G is a proper edge-coloring $\alpha$of G with colors $1,2, \dots, t$ such that all colors are used and the colors of edges incident to each vertex $v \in V(G)$ satisfy the condition $d_G(v) - 1 \leq \max\left(S(v, \alpha)\right) - \min(S(v, \alpha)) \leq d_G(v)$. This notion was introduced by Petrosyan and Arakelyan in 2007 [6]. In particular, in [6,7] Petrosyan, Arakelyan and Baghdasaryan proved that if a connected graph G has an interval $(t, 1)$-coloring, then $t \leq 2|V(G)| - 1$. They also described all possible values of t for which the complete graph K_n has an interval $(t, 1)$-coloring. In the same paper the authors proved that if G is a graph with $\Delta(G) \leq 3$, then it has a near-interval coloring. On the other hand, in [7] it was proved that for any integer $\Delta \geq 24$, there exists a connected graph G with the maximum degree Δ that has no near-interval coloring. In [8], Petrosyan, Khachatrian and Mamikonyan investigated near-interval colorings of bipartite graphs. In particular, they proved that all bipartite graphs with maximum degree 4 admit near-interval colorings. Some interesting results on biregular bipartite graphs were obtained by Casselgren and Toft [5]. In 2018, Petrosyan [9] proved that if G is a graph with $\Delta(G) \leq 4$, then it has a near-interval coloring. On the other hand, he also proved that for any integer $\Delta \geq 18$, there exists a connected bipartite graph G with maximum degree Δ that has no near-interval coloring. Recently, Pastuszak and Petrosyan proved that all bipartite graphs with maximum degree 5 have near-interval colorings.

If α is an interval $(t, 1)$-coloring of a graph G such thatmax$\left(S(v, \alpha)\right) - \min\left(S(v, \alpha)\right) = d_G(v) - 1$for any vertex $v \in V(G)$,

then α is called an *interval t-coloring* of G. This notion was introduced by Asratian and Kamalian in 1987 [3,4]. Note that every graph that has an interval t-coloing also has an interval $(t, 1)$-coloring but *not* every graph that has an interval $(t, 1)$-coloring also has an interval t-coloring. In general, it is an NP-complete problem to determine whether a bipartite graph has an interval coloring or not [10].

In the present paper we consider near-interval colorings of bipartite graphs. We first prove that all bipartite multigraphs with $\Delta(G) = 2r$ $(r \geq 2)$and vertex degrees $d_G(v) \in \{1, 2, 2r - 1, 2r\}$ have an interval $(2r, 1)$-coloring. Then we consider near-interval colorings of some class of bipartite graphs with maximum degree 6, and we show that all graphs from this class have an interval $(7,1)$-coloring.

2. Main Results

For two integers a and b with $a \leq b$, the set$\{a, a + 1, \dots, b\}$ is denoted by $[a, b]$.

A graph G is called *Eulerian* if it is both connected and has a closed trail (a walk with
no repeated edges) containing all edges of a graph. A *2-factor* of a graph G, where loops are allowed, is a *2-regular spanning subgraph* of G. We need the following classical result from factor theory [1].

Petersen's theorem. *Let G be a $2r$-regular graph (where loops are allowed). Then G can be represented as a union of edge-disjoint 2-factors.*

We now are able to formulate one of the main results of the paper.

Theorem 1. If G is a bipartite multigraph with $\Delta(G) = 2r$ $(r \geq 2)$ and for every vertex $v \in V(G), d_G(v) \in \{1, 2, 2r - 1, 2r\}$, then G has an interval $(2r, 1)$ – coloring.

Proof. *In the proof of this theorem we follow the idea from [2].Define a new graph G^* as follows: first take two isometric copies G_1 and G_2 of the graph G and join by an edge every vertex with an odd vertex degree in G_1*

with its copy in G_2. *Then for every vertex* $v \in V(G_1) \cup V(G_2)$ *of degree 2, add r-1 loops at* v. *Note, that* G^* *is a 2r-regular graph. By Peterson's theorem,* G^* *can be represented as a union of r edge-disjoint 2-factors* $F_1, F_2, \dots, F_r$. *By removing all loops from 2-factors* $F_1, F_2, \dots, F_r$ *of* G^*, *we obtain that the resulting graph* G' *is a union of edge-disjoint Eulerian subgraphs* $F'_1, F'_2, \dots, F'_r$. *Since* G^* *is bipartite, for each* i $(i = 1, 2, \dots, r) F'_i$ *is a collection of even cycles in* G'. *Next, for each* $F'_i (i = 1, 2, \dots, r)$ *of* G', *color the edges of* F'_i *alternately with colors 2i-1 and 2i. Let* α *be the resulting coloring of* G'. *Note that* α *is a proper edge-coloring of* G' *with colors 1,2, ..., 2r and it has the following properties.*

1. For each vertex $v \in V(G')$ *with* $d_{G'}(v) = 2r, S_{G'}(v, \alpha) = [1, 2r]$.

2. Since for each vertex $v \in V(G')$ *with* $d_{G'}(v) = 2$, *there exists exactly one Eulerian subgraph* F'_{i_v} *such that* $d_{F'_{i_v}}(v) = 2, S_{G'}(v, \alpha) = [2i_v - 1, 2i_v]$ *for some* i_v.

Now consider the restriction of this proper edge-coloring to the edges of graph G. *The resulting coloring of* G *has the following properties.*

1. For each vertex $v \in V(G)$ *with* $d_G(v) = 1$, $S_G(v, \alpha)$ *is* $\{2i_v - 1\}$ *or* $\{2i_v\}$ *for some* i_v.

2. For each vertex $v \in V(G)$ *with* $d_G(v) = 2, S_G(v, \alpha) = [2i_v - 1, 2i_v]$ *for some* i_v.

3. For each vertex $v \in V(G)$ *with* $d_G(v) = 2r - 1$, $S_G(v, \alpha)$ *is either* $[1, 2r] \backslash \{2i_v - 1\}$ *or* $[1, 2r] \backslash \{2i_v\}$ *for some* i_v.

4. For each vertex $v \in V(G)$ *with* $d_G(v) = 2r, S_G(v, \alpha) = [1, 2r]$.

Clearly, this coloring is an interval $(2r, 1)$ *– coloring of* G.

The next result concerns bipartite graphs with $\Delta(G) = 6$.

Theorem 2. Let G be a bipartite multigraph with bipartition (U, V). If for every vertex $u \in U, d_G(u) = 6$ and for every vertex $v \in V, d_G(v) \in \{1, 2, 4, 5, 6\}$, then G has an interval $(7, 1)$-coloring.

Proof. *Construct the auxiliary graph* G' *as described above. Note, that* G' *is a union of three edge-disjoint Eulerian subgraphs* F'_1, F'_2, F'_3 *and*

each F_i', $i = 1, 2, 3$, *is a collection of even cycles in* G'. *Then color the edges of* F_1' *alternately with colors 1 and 2. Similarly color the edges of* F_2' *with colors 3 and 5 and the edges of* F_3' *with colors 4 and 6. Let* α *be the resulting coloring of* G'. *Note that* α *is a proper edge-coloring of* G' *with colors [1,6].Consider the restriction of this proper edge-coloring to the edges of graph* G. *Note that the resulting coloring of* G *has the following properties.*

1. For each vertex $v \in V$ *with* $d_G(v) = 1$, *there is only one color in* $S_G(v, \alpha)$.

2. For each vertex $v \in V$ *with* $d_G(v) = 2$, *there exists only one Eulerian subgraph* F_{i_v}' *such that* $d_{F_{i_v}'}(v) = 2$ *and* $S_G(v, \alpha)$ *is an interval with at most one gap.*

3. For each vertex $v \in V$ *with* $d_G(v) = 4$, *there exists only one Eulerian subgraph* F_{i_v}' *such that* $d_{F_{i_v}'}(v) = 0$. *In this case* $S_G(v, \alpha)$ *is* $\{1,2,3,5\}, [3,6]$ *or* $\{1,2,4,6\}$. *If* $S_G(v, \alpha) = \{1,2,4,6\}$ *we recolor the edge with color 6 with color 0 and we obtain* $S_G(v, \alpha) = \{0,1,2,4\}$ *which is an interval with one gap.*

4. For each vertex $v \in V$ *with* $d_G(v) = 5$, $S_G(v, \alpha)$ *is an interval with at most one gap.*

5. For each vertex $v \in V$ *with* $d_G(v) = 6$, $S_G(v, \alpha) = [1, 6]$.

Finally, we shift the colors of edges by 1. It is easy to see that the resulting coloring of G *is an interval* $(7,1)$*-coloring.*

REFERENCES

1. *Akiyama J., Kano M.* Factors and Factorizations of Graphs, Proof Techniques in Factor Theory, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, 2011.
2. *Asratian A., Casselgren C. Petrosyan P.* Some results on cyclic interval edge colorings of graphs. J. Graph Theory 87, PP. 239–252, 2018.
3. *Асратян А.С., Камалян Р.Р.* Интервальные раскраски ребер мультиграфа, Прикладная математика. Вып. 5, СС. 25–34, 1987.
4. *Asratian A., Kamalian R.* Investigation on interval edge-colorings of graphs, J. Combin Theory Ser B, vol. 62. PP. 34–43, 1994.

5. *Casselgren C., Toft B.* On interval edge colorings of biregular bipartite graphs with small vertex degrees. J. Graph Theory, vol. 80, PP. 83–97, 2015.
6. *Petrosyan P., Arakelyan H.* On a generalization of interval edge-colorings of graphs, Mathematical Problems of Computer Science 29. PP. 26–32, 2007.
7. *Petrosyan P., Arakelyan H., Baghdasaryan V.* A generalization of interval edge-colorings of graphs, Discrete Applied Mathematics 158. PP. 1827–1837, 2010.
8. *Petrosyan P., Khachatrian H., Mamikonyan T.* On interval edge-colorings of bipartite graphs, IEEE Computer Science and Information Technologies (CSIT), 2015, Yerevan. PP. 71–76, 2015.
9. *Petrosyan P.* Near-intervaledge-coloringsofgraphs // 10-я Международная конференция «Дискретные модели в теории управляющих систем», МГУ, М., СС. 22–24, 2018.
10. *Севастьянов С.В.* Об интервальной раскрашиваемости ребер двудольного графа. Методы дискретного анализа в решении экстремальных задач. Вып. 50. СС. 61–72, 1990.
11. *West D.* Introduction to Graph Theory, Prentice-Hall, New Jersey, 2001.

О ПОЧТИ ИНТЕРВАЛЬНЫХ РАСКРАСКАХ НЕКОТОРЫХ ДВУДОЛЬНЫХ ГРАФОВ

Г.П. Матевосян

АННОТАЦИЯ

Правильная реберная раскраска α графа G в цвета $1,\dots,t$ называется почти интервальной t-раскраской (интервальной$(t,1)$-раскраской), если все цвета использованы и для каждой вершины $v \in V(G)$выполняется условие $d_G(v) - 1 \le \max(S(v,\alpha)) - \min(S(v,\alpha)) \le d_G(v)$, где $d_G(v)$–степень вершины v в графе G, а $S(v,\alpha)$– множество цветов ребер, инцидентных вершине v. В работе доказано, что все двудольные мультиграфы с максимальной степенью $\Delta(G) = 2r$ $(r \ge 2)$ и с $d_G(v) \in \{1, 2, 2r-1, 2r\}$ имеют интервальную $(2r,1)$-раскраску. Также доказано, что все двудольные графы с разбиением вершин(U,V), где для любой вершины $u \in U, d_G(u) = 6$, а для любой вершины $v \in V - d_G(v) \in \{1,2,4,5,6\}$, имеют интервальную $(7,1)$-раскраску.

Ключевые слова: интервальная раскраска, почти интервальная раскраска, интервальная (t,1) раскраска, двудольный граф.

ФИЗИКА

УДК 621.3.049.779

Поступила: 04.10.2019г.
Сдана на рецензию: 14.10.2019г.
Подписана к печати: 22.11.2019г.

CMOS NEGATIVE CAPACITANCE WITH IMPROVED AC PERFORMANCE

A. Atanesyan

Institute of Radiophysics and Electronics

atanesya@synopsys.com

ABSTRACT

Negative capacitance schemes are very useful analog standard blocks with a wide range of usage. They can be used to solve such a significant problem as parasitic reducing and compensation, increasing of amplifiers operating frequency and for filters design calibration without using passive inductors, among other uses.

The method for improving and controlling CMOS floating negative capacitance frequency response is presented in this paper. The negative capacitance is obtained by the basic negative impedance converter (NIC); the proposed method is also fitted for negative inductance and resistance. The proposed approach has been tested for 14nm FINFET technology.

Keywords: negative capacitance, parasitic reducing, high frequency performance.

Introduction

Negative capacitance schemes or negative capacitance generators (NCG) are applicable analog building cells, used for many different applications enabling:

• the improvement of already existing architectures, through the compensation of undesired parasitic capacitance, like bandwidth improvement of various kind of amplifiers [6], [7], opportunity to speed up some DAC architectures, improvement of ESD protection circuits [3], improvement of active inductor design [1], [4], etc.;

• the design of new circuit architectures like the new compact equalization filters, new RC and LC oscillator structures, etc.

There are also other techniques for grounded and floating negative capacitance generation, mostly known for decays.

Generally, any other well-known negative impedance converter (NIC) which employs operational amplifiers or current conveyors can be used. Negative capacitance obtained with presented approach is more precise, with a wide allowable signal swing. The presented approach has disadvantages like required large area and high-power consumption, particularly for floating capacitor generation, and performance for high frequency is limited.

Also, other known basic structures can be used as a floating NC, for example, common source amplifier with cross-coupled capacitors and source's parallel r-C pairs [2], or the relaxation generator with cross-coupled MOSFETs described in [3] which is a highly effective approach.

The mentioned structure generates a negative capacitance and negative resistance as well and performs with a predictable noise figure and degradation of linearity; it is quite basic, and provides great possibilities for improvements and controllability and was thereby chosen for the design and performance estimating.

Implementation

A. Common Negative Capacitance

The simple way to obtain floating negative capacitance is a cross-coupled pair of transistors on a basis of positive feedback.

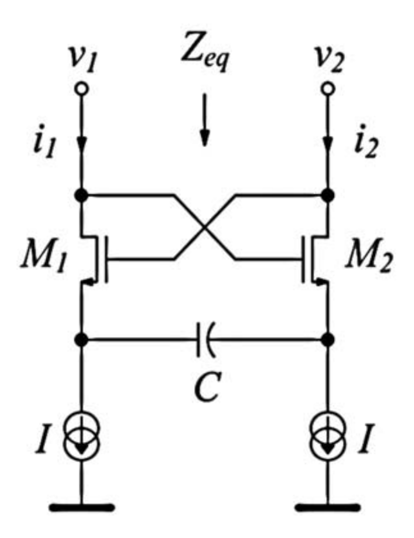


Fig. 1. Basic negative capacitance.

The positive feedback loop is obtained by transistors M1 and M2 which is formed because of difference at the output currents to get an opposite polarity to the differential voltage.

Hence, the output impedance is negative. The equivalent impedance can be given by

$$Z_{equ} = -\frac{1}{sC}\frac{g_m+s(C_{GS}+2C)}{g_m-sC_{GS}} \qquad (1)$$

In equation channel length modulation is disregarded. As long as $f \ll f$T, where fT is the unity gain frequency or switching frequency of transistors, also impedance can be approximated by

$$Z_{equ} \approx -\frac{1}{sC}-\frac{(C_{GS}+2C)}{g_m C}, f \ll f\mathrm{T} \qquad (2)$$

The impedance at the output is the complex impedance with reactive and resistive components. The circuit with a shorted capacitor

C can be used as negative resistance. Further modification presented in [5] enabled a negative inductance generation as well.

Fig. 2 (a) and (b) show the structure of negative resistance and inductance circuits [5].

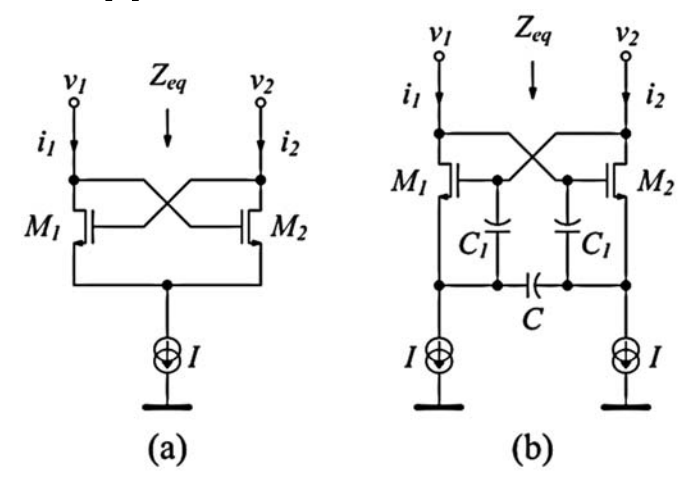


Fig. 2. Schematic views of (a) negative resistance and (b) negative inductance generators.

B. A Simplified Implementation Model

The NCG described above is loaded with the rest of the schemes where it operates as a negative capacitor, and disadvantages like possible stability issues mostly depend on the application details. An undefined load will be replaced with dynamic load for further analysis. MOSFETs shown as current sources are for simplicity. An equivalent schematic diagram is shown in Fig. 3

In Fig. 4 there is shown equivalent impedance and negative capacitance of NCG. It has been assumed that the transistors are with ideal parameters, without parasitic capacitance but with realistic constant transconductance gm. Transconductance defines the value of negative resistance while the C defines the negative capacitance. The transistors' transconductance and capacitance define the higher limit of the NCG. In

Fig.5 the equivalent negative capacitances for several capacitor values is shown. Ideally, only the sign will be opposite.

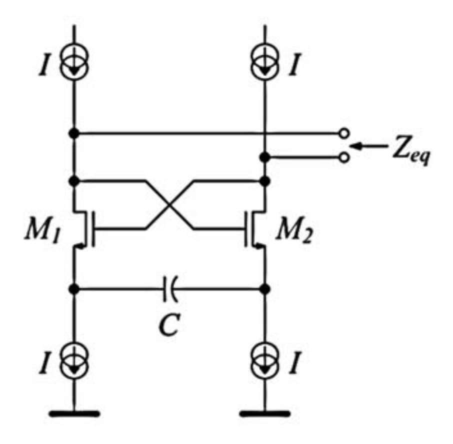


Fig. 3. Simple NCG with load.

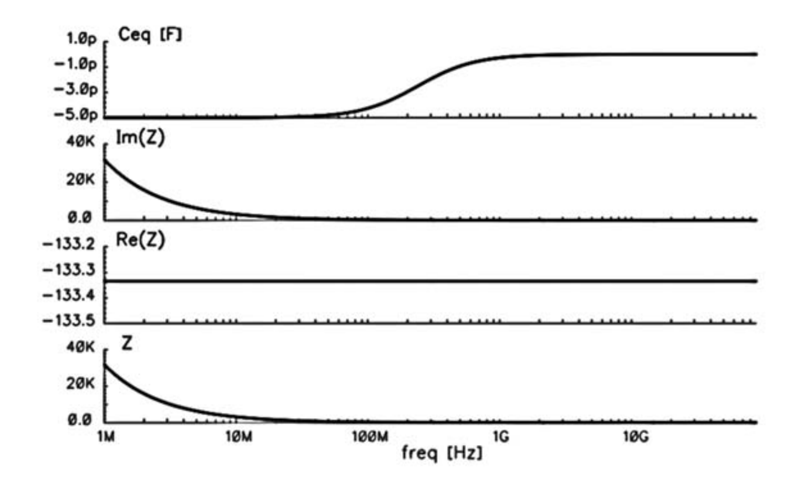


Fig. 4. Simple NCG model. Negative capacitance and complex impedance.

To increase the high limit of frequency, the range of the value of C needs to be reduced. In real design this process it is not permit table. Another way to expand bandwidth is to increase currents and transistors transconductance.Fig.6 shows expected changes.

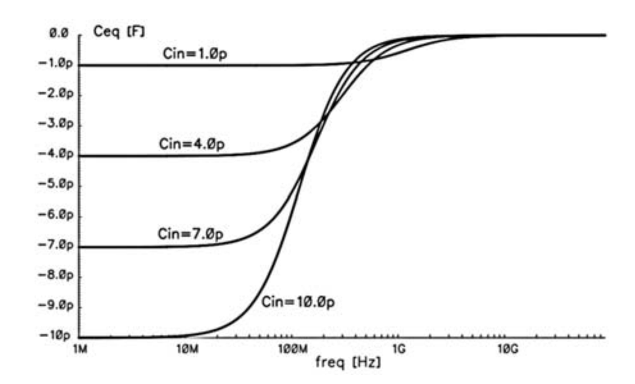


Fig. 5. Negative capacitance vs input capacitance, ideal model.

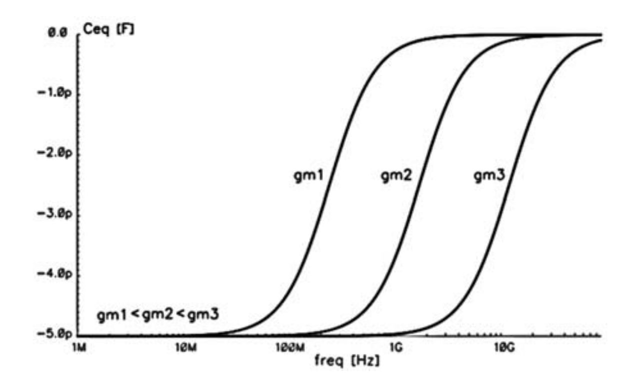


Fig. 6. Negative capacitance vs. transconductance, ideal model.

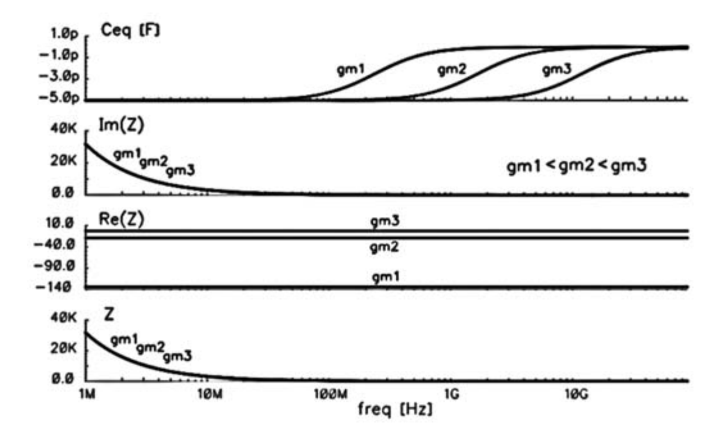


Fig. 7. Negative capacitance and complex impedance vs. transconductance, ideal model.

High limit of bandwidth depends on transistors' transconductance and current I value. Therefore, circuit controlling is becoming easy. The complex impedance is shown below in Fig. 7.

Verification:

A. General Information

The circuit has been designed with 14nm FINFEET technology, but the proposed design can be implemented in other technologies by optimization according to a specific design.

B. Physical Implementation

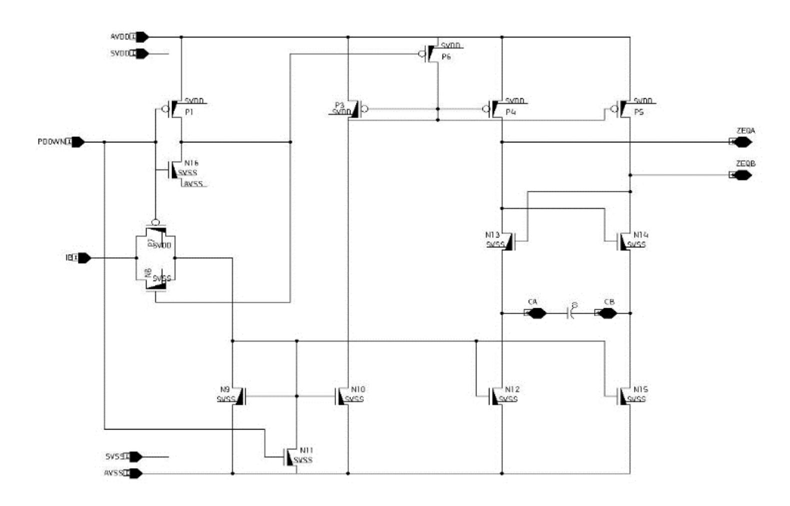


Fig. 8. Negative Capacitance Generator.

In Fig. 8 the proposed NCG is presented. The ideal current source is replaced by sink mirrors. The power down circuit gives an opportunity to enable parallel connection between several NCGs. This technique is implemented to control transconductance of transistors by changing W\L ratios.

In Fig. 9 real circuit vs. model comparison is depicted. Transistors' Cgs parasitics is the main cause of difference. It can be compensated by increasing capacitance C value.

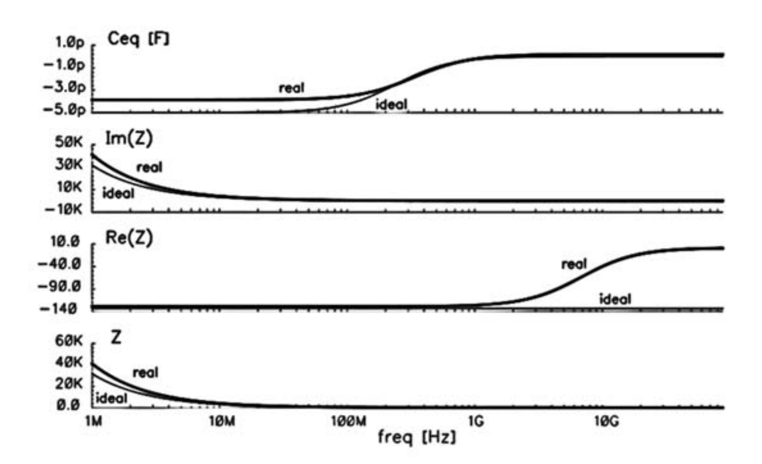


Fig. 9. Complex impedance and Negative capacitance, model vs. real circuit.

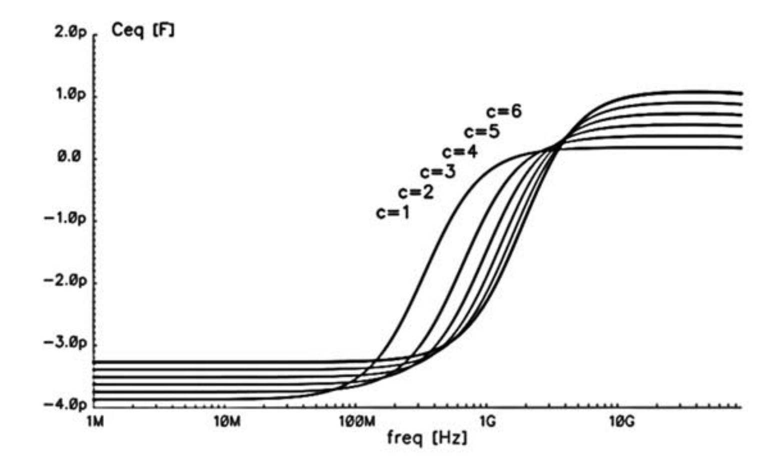


Fig. 10. Negative capacitance vs. transconductance.

In Fig. 10 the bandwidth high limit characteristics for different transconductance values is shown. Parallel connected simple NCGs increases the high frequency limit for almost every decade. Also, bandwidth can be controlled by current. Fig.11 shows the controllability of IB current.

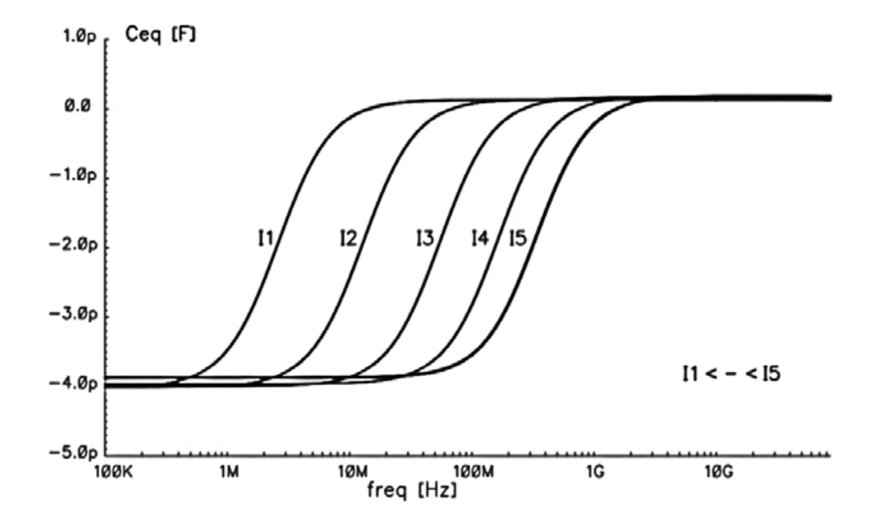


Fig. 11. Negative capacitance vs. current.

Conclusion:

A simple approach to increase and control the NCG bandwidth high limit is presented. The technique makes it achievable to increase frequency range and control high frequency limit with high precision. The technique can be used for Rc oscillators design. The same technique can be used for high speed I/O parasitic resistance reduction and thereby high frequency performance improvement.

REFERENCES

1. *Reja M.M., Moez K., Filanovsky I.* A wide frequency range CMOS active inductor for UWB bandpass filters, 52-nd IEEE International Midwest Symposium on Circuits and Systems, 2009.
2. *Aznar F., Celma S., Calvo B., Digon D.* A fully integrated inductorless AGC amplifier for optical gigabit ethernet in 0.18µm CMOS, IEEE International Symposium on Industrial Electronic, 2008.PP. 1662–1667.
3. *Gallal S., Razavi B.* 40-Gb/s amplifier and ESD protection circuit in 0.18µm CMOS technology, IEEE J. Solid-State Circuits vol. 39, Dec. 2004. PP. 2389–2396.

4. *Andriesei, L. Goraş, F. Temcamani, B. Delacressonnier.* Improved RF CMOS Active Inductor With High Self-Resonant Frequency, IEEE International Conference on Electronics, Circuits, and Systems, Athens, 2010.
5. *Yoo K., Abdul-Latif M.M., Han G., Sánches-Sinencio E.* Negative Impedance Circuit and Its Application to Inductorless Resonant Oscillators, ProcInt SOC Conference, 2007. PP. 13–16.
6. *Yoo K., Lee D., Han G., Park S.M., Oh W.S.* A 1.2V 5.2mW 40dB 2.5-Gb/s Limiting Amplifier in 0.18μm CMOS Using Negative-Impedance Compensation in Proc. ISSCC, San Francisco, CA, Feb. 2007. PP. 56–57.
7. *Youn J.S., Kang H.S., Lee M.J., Park K.Y., Choi W.Y.* High-Speed CMOS Integrated Optical Receiver With an Avalanche Photodetector, IEEE Photonics Technology Letters, VOL. 21, NO. 20, October 15, 2009. PP. 1553–1555.
8. *Allen P.E., Holberg D.R.* CMOS Analog Circuit Design, 2nd Edn., Oxford University Press, 2002.
9. *Razavi B.* Design of Analog CMOS Integrated Circuits, International Edition, McGraw-Hill, 2001.

ОТРИЦАТЕЛЬНАЯ ЕМКОСТЬ КМОП С УЛУЧШЕННЫМИ ЧАСТОТНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ

А.А. Атанесян

АННОТАЦИЯ

Схемы с отрицательной емкостью представляют собой очень полезные аналоговые стандартные блоки с широким спектром применения. Их можно использовать для решения таких важных проблем, как уменьшение и компенсация паразитных емкостей, увеличение рабочей частоты усилителей, а также для калибровки фильтров без использования пассивных индукторов и т.д.

В статье представлен метод улучшения и управления частотной характеристикой плавающей отрицательной емкости КМОП. Отрицательная емкость получается базовым преобразователем отрицательного комплексного сопротивления (NIC). Предлагаемый способ также подходит для отрицательной индуктивности и сопротивления. Предложенный подход был протестирован для 14-нм технологии FINFET.

Ключевые слова: отрицательная емкость, уменьшение паразитных составляющих, высокочастотные характеристики.

ХИМИЯ

УДК 547.874.7

Поступила: 17.12.2019г.
Сдана на рецензию: 20.12.2019г.
Подписана к печати: 27.12.2019г.

СИНТЕЗ НОВЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНО БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 2-ДИМЕТИЛАМИНО-4,6-ДИХЛОР-1,3,5-ТРИАЗИНА

Ж.А. Азарян

ГОУ ВПО Российско-Армянский университет, ИБМиФ

zhermen.azaryan@gmail.com

АННОТАЦИЯ

На базе 2-диметиламино-4,6-дихлор-1,3,5-триазина синтезирован метил (4-хлор-6-(диметиламино)-1,3,5-триазин-2-ил)глицинат, который подвергнут дальнейшим превращениям. Замещением атома хлора в молекуле последнего получена соответствующая четвертичная аммониевая соль, взаимодействием которой с калиевыми солями 5-S-замещенных призводных1,2,4-триазола и 2-аминотиазолом синтезирован ряд производных неконденсированных би- и тригетероциклических систем с сочетанием в молекулах 1,3,5-триазинового цикла и различных азолов. Гидразинолизом метил глицината получен его гидразид, который с различнымиарилальдегидами образует соответствующие арилиденацетогидразиды. Синтезированные соединения проявили в эксперименте стимулирующее действие на рост растений.

Ключевые слова: метил (4-хлор-6-(диметиламино)-1,3,5-триазин-2-ил)глицинат, 1,2,4-триазолил- и 2-аминотиазолилтриазины,

триазиниламиноарилиденацетогидразиды, конформационная и Z,E-изомерия, ростостимулирующая активность.

Введение

В настоящее время удовлетворение потребностей растущего населения планеты продуктами питания является одной из основных проблем науки. Повышение урожайности сельскохозяйственных культур достигается использованием минеральных удобрений и пестицидов. Хотя уже разрабатываются биологические удобрения и средства защиты растений, тем не менее по масштабам применения они пока не могут конкурировать с химическими препаратами. Экологические требования к последним становятся все более жесткими, поскольку остаточные количества пестицидов и продуктов их разложения могут накапливаться в почве и воде, а, следовательно, и проникать в продукты питания. Помимо этого при длительном использовании химических средств защиты растений у вредителей и возбудителей болезней сельхозкультур вырабатывается резистентность по отношению к применяемым препаратам. Эти обстоятельства делают необходимым постоянно пополнять арсенал пестицидов новыми, экологически более безопасными средствами борьбы. При этом большое практическое значение имеет выявление активных препаратов в ряду новых систем, по отношению к которым у вредителей и возбудителей болезней еще не сформировалась резистентность.

Производные гетероциклических азинов, в частности 1,3,5-триазина, проявляют широкий спектр биологической активности. Ряд лекарств и пестицидов, широко используемых в медицинской практике и сельском хозяйстве, был синтезирован на основе 1,3,5-триазина [1, 2]. В последние годы среди его производных выявлены соединения с антибактериальной [3–11], противогрибковой [10,11], противовирусной [12,13], противотуберкулузной [14], противораковой [15–21], анти-ВИЧ [22], антитрипаносомной [23] и антималярийной [24, 25] активностями.

В сельском хозяйстве в основном применяются гербициды ряда триазина и итриазинона, а также большой ряд их сульфуроновых производных. В то же время, судя по литературным данным, мало изучены соединения с комбинацией 1,3,5-триазинового кольца с другими фармакофорными гетероциклами, в частности с азолами (1,2,4-триазолом,тиазолом и изоксазолом), хотя на базе последних синтезирован и широко применяется в сельском хозяйстве целый арсенал пестицидов.

Целью данной работы была разработка доступных и эффективных методов синтеза новых производных 1,3,5-триазина, а также соединений с сочетанием в молекуле 1,3,5-триазина с 1,2,4-триазольным, тиазольными изоксазольным цикламии изучение их биологической активности с точки зрения поиска новых экологически более безвредных пестицидов или регуляторов роста растений.

Результаты и обсуждение

Реакцией исходного 2,4-дихлор-6-диметиламино-1,3,5-триазина (**1**) с гидрохлоридом метилового эфира глицина в среде ацетона синтезирован соответствующий эфир (**2**). Последующее замещение второго атома хлора обычно протекает труднее и с меньшим выходом, поэтому сначала была получена триметиламмониевая соль 1,3,5-триазина (**3**) и далее осуществлены реакции с предварительно полученными калиевыми солями 5-S-замещенных призводных1,2,4-триазола и 2-аминотиазолом, в результате которых синтезированы целевые продукты – ряд производных неконденсированных би- и тригетероциклических систем с сочетанием в молекулах 1,3,5-триазинового цикла и различных азолов (**4, 5**).

С целью синтеза арилиденгидразидов (**7**) сначала взаимодействием эфира **2** с 63% гидразином синтезирован соответствующий гидразид, который с арилальдегидами образует целевые продукты **7**.

$R = CH_2Ph; CH_2COOCH_3; CH_2CH_2OPh$;

$R_1 = H; OCH_3$

Синтезированные соединения очень интересны с точки зрения протекающих в их молекулах процессов динамической изомерии. Так, в спектрах ЯМР всех соединений для диметиламинного и аминоэфирного заместителей триазинового цикла наблюдаются по два набора сигналов, что связано с заторможенным внутренним вращением этих групп вокруг связей N-гетероцикл. Повышение порядка указанных связей обусловлено взаимодействием неподеленных электронных пар экзоциклических атомов азота с p-электронными орбиталями триазинового цикла. Аналогичные процессы конформационной изомерии в молекулах 2,4-алкил (диалкил) аминозамещенных производных 1,3,5-триазина описаны в работе [26].

В случае соединений **7** к указанным динамическим процессам добавляется также *Z,E*-изомерия при двойной связи C=N. В этом случае преобладает стерически более выгодный *E*-изомер.

Биологические свойства синтезированных соединений

Синтезированные соединения были подвергнуты лабораторно-вегетационным испытаниям для определения гербицидных, фунгицидных росторегулирующих свойств синтезированных соединений. Практически все соединения продемонстрировали стимулирующее действие на рост растений. Эксперименты проводились на семенах и саженцах фасоли обыкновенной (*Phaseolusvulgaris L.*). Изучалось влияние водных суспензий соединений **1**–**7** в концентрациях 25 и 50 мг/л на жизнеспособность семян, прорастание и рост рассады. Эти данные сравнивались с аналогичным эффектом растворов гетероауксина тех же концентраций. Активность соединений колебалась в интервале 46–87% по сравнению с гетероауксином. Данные биологического скрининга отражают интересный факт, когда в ряде случаев стимулирующее действие растворов с меньшей концентрацией оказалось выше более концентрированных растворов. Вещества, проявившие в эксперименте активность выше 70% (**4a, 4b, 7b**), отобраны для более глубокого изучения и дальнейших полевых испытаний с применением также растворов синтезированных соединений в концентрациях < 25 мг/л.

Экспериментальная часть

Спектры ЯМР ^{1}H и ^{13}C сняты при $30^{0}C$ на спектрометре ЯМР Varian Mercury-300 (300 и 75 MHz, соответственно) в смеси растворителей ДМСО-d_6+CCl_4 (3:1) с применением стандартной импульсной последовательности, в качестве внутреннего стандарта использовался ТМС. Для синглетных, уширенных синглетных, дублетных, триплетных, квадруплетных и мультиплетных сигналов ЯМР использовались сокращения: *с, уш.с, д, т, к* и *м*. Ход реакций и чистота полученных соединений проверялась методом ТСХ на пластинах "Silufol UV-254" в качестве элюента использовалась смесь ацетон/гексан (2:1). Температуры плавления определялись капиллярным методом и не корректированы.

Метил (4-хлор-6-(диметиламино)-1,3,5-триазин-2-ил) глицинат (2). К смеси 0.01 моля 2,4-дихлор-6-диметиламино-1,3,5-триазина (**1**) и 0.01моля гидрохлорида метилового эфира глицина в 30 мл ацетона при охлаждении (-5–0°С) прикапывают водный раствор 0.02 моля Na_2CO_3. Нагревают 2 часа при 50–55°С, приливают к холодную воду и фильтруют. Выход 81%, т.пл. 173–175°С. Спектр ^{1}H ЯМР δм.д., J (Гц): 3.07 и 3.11 (с,с, 6Н, $N(CH_3)_2$); 3.67 и 3.70 (с,с, 3Н, OCH_3); 3.94 и 4.00 (д,д, J=6.1 Гц, 2Н, NCH_2); 7.51 и 7.94 (т,т, J=6.1 Гц, 1Н, NH). Спектр ^{13}C ЯМР δм.д.: 35.5, 35.7, 41.7, 42.0, 51.0, 164.3, 165.1, 168.0, 169.5.

4-(Диметиламино)-6-((2-метокси-2-оксоэтил)амино)-N,N,N-триметил-1,3,5-триазиниламмониумхлорид (3). К раствору 0.01 моля соединения **2** и 10–15 мл бензола при охлаждении прибавляют 0.015 моля $N(CH_3)_3$ в бензоле. Оставляют при 20°С на ночь. Выпавший осадок фильтруют, промывают эфиром и хранят в эксикаторе. Выход 84%, т.пл. 138–140°С. Спектр ^{1}H ЯМР δм.д., J (Гц): 3.10 и 3.15 (с,с, 6Н, $N(CH_3)_2$); 3.41 (с, 9Н, $N(CH_3)_3$); 3.68 и 3.72 (с,с, 3Н, OCH_3); 3.96 и 4.03 (д,д, J=6.1 Гц, 2Н, NCH_2); 7.68 и 8.02 (т,т, J=6.1 Гц, 1Н, NH).

Синтез соединений 4a-d

Сначала в ацетоне из 0.01 моля соответствующего S-замещенного триазола и 0.01 моля измельченного KOH получают его калиевую

соль, затем при охлаждении по порциям прибавляют соединение **3**. Оставляют на ночь, после чего нагревают при 45–50°C до полного выделения триметиламина. Смесь упаривают, обрабатывают водой и фильтруют продукт реакции.

Метил (4-(5-(бензилтио)-1*H*-1,2,4-триазол-1-ил)-6-(диметиламино)-1,3,5-триазин-2-ил)глицинат (4a). Выход 95%, т.пл. 155–156°C. Спектр ^{1}H ЯМР δм.д., J (Гц): 3.13, 3.17, 3.22 и 3.24 (с,с,с,с, 6H, $N(CH_3)_2$); 3.69 и 3.70 (с,с, 3H, OCH_3); 4.00 и 4.12 (д,д, J=6.0 Гц, 2H, NCH_2); 4.39 и 4.40 (с,с, 2H, SCH_2); 7.18-7.45 (м, 5H, C_6H_5); 7.60 и 8.13 (т,т, J=6.0 Гц, 1H, NH); 9.06 и 9.12 (с,с, 1H, CH-триазол). Спектр ^{13}C ЯМР δм.д.: 34.99, 35.03, 35.05, 35.63, 42.0, 42.1, 51.0, 126.6, 126.7, 127.7, 127.8, 128.5, 128.6, 137.0, 144.40, 144.42, 159.2, 161.7, 164.7, 165.7, 169.6.

Метил 2-((1-(4-(диметиламино)-6-((2-метоки-2-оксоэтил)амино)-1,3,5-триазин-2-ил)-1*H*-1,2,4-триазол-5-ил)тио)ацетат (4b). Выход 79%, т.пл. 138–139°C. Спектр ^{1}H ЯМР δм.д., J (Гц): 3.13, 3.17, 3.20 и 3.22 (с,с,с,с, 6H, $N(CH_3)_2$);3.70 и 3.73 (с,с,6H, 2×OCH_3);4.00 и 4.10 (д,д, J=6.1 Гц, 2H, NCH_2);4.03 (с, 2H, SCH_2);7.62 и 8.18 (т,т, J=6.0 Гц, 1H, NH); 9.06 и 9.13 (с,с, 1H, CH-триазол). Спектр ^{13}C ЯМР δм.д.: 22.0, 28.7, 29.0, 31.3, 32.65, 32.68, 35.54, 35.67, 35.78, 35.80, 42.1, 51.05, 51.20, 51.77, 51.85, 144.7, 159.2, 160.8, 164.7, 165.0, 165.7, 168.1, 169.6.

Метил (4-(диметиламино)-6-(5-((2-феноксиэтил)тио)-1*H*-1,2,4 -триазол-1-ил)-1,3,5-триазин-2-ил)глицинат (4c). Выход 82%, т.пл. 135-137°C. Спектр ^{1}H ЯМР δм.д., J (Гц): 3.12, 3.18, 3.20 и 3.21 (с,с,с,с, 6H, $N(CH_3)_2$); 3.52 (т, J=6.5 Гц, SCH_2);3.70 (с,3H, OCH_3); 4.00 и 4.10 (д,д, J=6.0 Гц, 2H, NCH_2); 4.30 (т, J=6.5 Гц, OCH_2); 6.85-7.28 (м, 5H, C_6H_5);7.60 и 8.18(т,т, J=6.0 Гц, 1H, NH);9.08 и 9.15 (с,с, 1H, CH-триазол). Спектр ^{13}C ЯМР δм.д.: 29.0, 29.6, 29.7, 35.5, 35.7, 35.8, 41.9, 42.1, 51.0, 51.1, 66.0, 66.1, 114.1, 114.2, 120.2, 120.3, 128.8, 128.9, 144.57, 144.59, 144.65, 157.8, 157.9, 159.3, 161.5, 164.7, 165.0, 165.7, 165.9, 169.62, 169.65, 169.97.

Метил (4-(диметиламино)-6-(5-((3,5-диметилизоксазол-4-ил)-тио)-1*H*-1,2,4- триазол-1-ил)-1,3,5-триазин-2-ил)глицинат(4d). Выход 78%, т.пл. 213–215°C. Спектр ^{1}H ЯМР δм.д., J (Гц): 2.23 и 2.24 (с,с, 3H, $OCCH_3$-изокс.); 2.50 (с, 3H, $NCCH_3$-изокс.); 3.12, 3.15, 3.20 и 3.22 (с,с,с,с, 6H, $N(CH_3)_2$); 3.69 и 3.70 (с,с, 3H, OCH_3); 3.98 и 4.08 (д,д, J=6.0 Гц, 2H, NCH_2); 7.62 и 8.23 (т,т, J=6.0 Гц, 1H, NH); 9.00 и 9.11 (с,с, 1H, CH-триазол). Спектр^{13}C ЯМР δм.д.: 9.7, 11.1, 35.54, 35.61, 35.67, 35.79, 41.9, 42.1, 51.0, 51.2, 101.2, 144.8, 145.0, 159.2, 160.1, 161.2, 164.6, 165.7, 165.9, 169.6, 172.5.

Этил 2-((4-(диметиламино)-6-((2-метоки-2-оксоэтил)амино)-1,3,5-триазин-2-ил)амино)-4-метилтиазол-5-карбоксилат (5). К смеси 0.01 моля 2-аминотиазола и 0.01 моля соединения **3** в 10 мл ацетона при охлаждении (-5–0 °C) по порциям добавляют сухой KOH. Нагревают 3 ч при температуре 40–45 °C, фильтруют, ацетон упаривают, добавляют воду и выпавший осадок отфильтровывают. Выход 89%, т.пл. 270-273°C. Спектр^{1}H ЯМР δм.д., J (Гц): 1.27 и 1.28 (т,т, J=7.0 Гц, 3H, $OCH_2\mathit{CH_3}$); 2.50 (с, 3H, CH_3-тиаз.); 3.10, 3.13, 3.20 и 3.22 (с,с,с,с, 6H, $N(CH_3)_2$);3.63(с,3H, OCH_3); 3.96 и 4.10 (д,д, J=6.0 Гц, 2H, NCH_2); 4.22 (к, J=7.0 Гц, 2H, $O\mathit{CH_2}CH_3$); 7.56 (уш.к, 1H, NH); 11.39 (ушс, 1H, NH).

2-((4-Хлор-6-(диметиламино)-1,3,5-триазин-2-ил)амино)ацетогидразид (6).Смесь 0.01 моля соединения **2** и 10 мл 63% N_2H_4 перемешивают при комнатной температуре два дня. Добавляют 10 мл воды и фильтруют соединение **6**. Выход 90%, т.пл. 185-187°C. Спектр ^{1}H ЯМР δм.д., J (Гц): 3.12 (с, 6H, N $(CH_3)_2$); 3.82 (д, J=6.0 Гц, 2H, NCH_2); 4.18 (ушс, 2H, MH_2); 7.48 (ушс, 1H, NH); 8.80 (ушс, 1H, NH).

Синтез соединений 7a,b

К смеси 0.01 моля соединения **6** и 10 мл воды по каплям прибавляют 0.01 моля 20% HCl, затем 0.01 моля соответствующего альдегида. Перемешивают при 20°C 4 часа и оставляют на ночь. Выпавший осадок фильтруют.

***N′*-Бензилиден-2-((4-хлор-6-(диметиламино)-1,3,5-триазин-2-ил)амино)ацетогидразид (7a).** Выход 95%, т.пл. 225-227°C. Спектр ^1H ЯМР δм.д., J (Гц): 3.18 (с, 6H, $N(CH_3)_2$); 4.07, 4.19, 4.50 и 4.58 (д,д,д,д, J=6.0 Гц, 2H, NCH_2); 7.35-8.03 (м, 5H, C_6H_5); 8.03и 8.24 (с,с, 1H, CH=N); 9.20 (шс, 1H, NH); 11.63и 11.98 (ушс, 1H, NNH).

2-((4-Хлор-6-(диметиламино)-1,3,5-триазин-2-ил)амино)-*N′*-(4-метоксибензилиден)ацетогидразид (7b). Выход 87%, т.пл. 211-212°C. Спектр ^1H ЯМР δм.д., J (Гц): 3.11 (с, 6H, $N(CH_3)_2$); 3.78 и 3.80 (с,с, 3H, OCH_3); 4.08, 4.18, 4.50 и 4.55 (д,д,д,д,J=6.0 Гц, 2H, NCH_2); 6.95-7.96 (м, 4H, C_6H_4); 8.02 и 8.22 (с,с, 1H, CH=N); 9.00 (шс, 1H, NH); 11.58 и 11.90 (ушс, 1H, NNH).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Машковский М.Д.* Лекарственные средства, 16-е издание, Изд-во «Новая Волна», 2012.
   http://www.alanwood.net/pesticides/class_pesticides.html
2. *Patel D.H., Chikhalia K.H., Shah N.K., Patel D.P., Kaswala P.B., Buha V.M.* Synthesis and antimicrobial studies of *s*-triazine based heterocycles // Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry, 2010, V. 25(1). PP. 121–125.
3. *Zhou Ch., Min J., Liu Zh., Young A., Deshazer H., Gao T., Chang Y.-T., Kallenbach N.R.* Synthesis and biological evaluation of novel 1, 3, 5-triazine derivatives as antimicrobial agents // Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters 2008 V. 18. PP. 1308–1311.
4. *Sharma A., Ghabbour H., Khan Sh.T., Torre B.G., Albericio F., El-Faham A.* Novel pyrazolyl-s-triazine derivatives, molecular structure and antimicrobial activity // Journal of Molecular Structure 2017. PP. 244–253.
5. *Ghosh S.K., Saha A., Hazarika B., Singh U.P., Bhat H.R., Gaht P.* Design, facile synthesis, antibacterial activity and structure-activity relationship of novel di- and tri-substituted 1,3,5-triazines// Letters in Drug Design & Discovery 2012 V. 9(3). PP. 329–325.
6. *Cholera A.Y, Ladva K.D.* A convenient synthesis of trisubstituted 1,3,5-triazine derivatives and theirantimicrobial screening // Der PharmaChemica 2018. V. 10(4). PP. 57–61.

7. *Jana S., Das A.*Synthesis and antibacterial activity of some novel 4-benzyl-piperazinyl-*s*-triazine derivatives //Asian Journal of Chemistry 2013 V. 25(1). PP. 186–190.
8. *Patel D., Patel R., Kumari P., Patel N.* Microwave assisted synthesis and *in vitro* antimicrobial assessment of quinolone based *s*-triazines // Heterocyclic Communications 2011 V. 17(1–2), PP. 33–41.
9. *Ratha A., Thakor M.K.* Design, synthesis and *in vitro* antimicrobial activity of trisubstituted s-triazine // ActaChimica and PharmaceuticaIndica 2015. V. 5(2). PP. 60–67.
10. *Dongre R.P.,RathodSh.D.*Design, synthesis and pharmacological evaluation of new series of 2-pyrazoline containing s-triazine and their derivatives// Der ChemicaSinica, 2016, 7(4): 36–41(antibac and antifungal)
11. *Gao W.-L., Li J.-X* Design, synthesis, and structure-activity relationship of imidazolidin-2-one-1,3,5-triazine conjugates as Enterovirus 71 and Coxsackievirus A16 Inhibitor // Biomedical Research 2017 V. 28(2). PP. 811–816.
12. *Wang Q., Liu G., Shao R., Huang R.* Synthesis and Antivirus Activity of 1,3,5-Triazine Derivatives // Heteroatom Chemistry 2003 V.14(6). PP. 542–545.
13. *Sunduru N., Gupta L., Chaturvedi V., Dwivedi R., Sinha S., Chauhan P.M.S.* Discovery of new 1,3,5-triazine scaffolds with potent activity against *Mycobacterium tuberculosis* H37Rv // European Journal of MedicinalChemistry 2010 V. 45. PP. 3335–3345.
14. *Zhou Z., Zhang Y., Yan N., Wang Y., T.Sun*Design, synthesis and biological evaluation of novel 1,3,5-triazines derivatives as potent antitumor agents // Medicinal chemistry 2015 V. 5(8). PP. 345–350.
15. *Makowska A., Saczewski F., Bednarski P.J., Saczewski J., Balewski Ł.* Hybrid molecules composed of 2,4-diamino-1,3,5-triazines and 2-imino-coumarins and coumarins. Synthesis and cytotoxic properties // Molecules 2018 V. 23. P. 1616.
16. *Balaha M.F., El-Hamamsy M.H., Sharaf El-Din N.A., El-Mahdy N.A* Synthesis, evaluation and docking study of 1, 3, 5-triazine derivatives as cytotoxic agents against lung cancer // Journal of Applied Pharmaceutical Science 2016 V. 6(4). PP. 28–45.
17. *Foster B.J., Harding B.J., Leyland-Jones B., Hoth D.*Hexamethylmelamine: a critical review of an active drug // Cancer Treatment Rewies1986 V. 13(4). PP. 197–217.
18. *Tranchand B., Catimel G., Lucas C., Sarkany M., Bastian G., Evene E.* Phase I clinical and pharmacokinetic study of S9788, a new multidrug-resistance reversal

agent given alone and in combination with doxorubicin to patients with advanced solid tumors // Cancer Chemotherapy Pharmacology 1998 V. 41(4). PP. 281–291.

19. *Maeda M., Ligo M., Tsuda H., Fujita H., Yonemura Y., Nakagawa K* Antimetastatic and antitumor effects of 2, 4-diamino-6-(pyridine-4-yl)-1,3,5-triazine (4PyDAT) on the high lung metastatic colon 26 tumor in mice // Anticancer Drug Designe 2000 V. 15(3). PP. 217–223.
20. *Menicagli R., Samaritani S., Signore G., Vaglini F., Dalla Via L.* In vitro cytotoxic activities of 2-alkyl-4, 6-diheteroalkyl-1, 3, 5-triazines: new molecules in anticancer research // Journal of Medicinal Chemistry 2004 V. 47(19). PP. 4649–4652.
21. *Sakakibara N., Balboni G., Congiu C., Onnis V., Demizu Y., Misawa T., Kurihara M., Kato Y., Maruyama T., Toyama M., Okamoto M., Baba M.* Design, synthesis, and anti-HIV-1 activity of 1-substituted 3-(3,5-dimethylbenzyl)triazine derivatives // Antiviral Chemistry and Chemotherapy 2015 V. 24(2). PP. 62–71.
22. *Klenke B., Stewart M., Barrett M.P., Brun R., Gilbert I. H.* Synthesis and Biological Evaluation of *s*-Triazine Substituted Polyamines as Potential New Anti-Trypanosomal Drugs // Journal of Medicinal Chemistry 2001 V.44. PP. 3440–3452.
23. *Jensen N.P., Ager A.L., Bliss R.A., Canfield C.J., Kotecka B.M., Rieckmann K.H.* Phenoxypropoxybiguanides, prodrugs of DHFR-inhibiting antimalarials diaminotriazine // Journal of Medicinal Chemistry 2001 V. 44(23). PP. 3925–3931.
24. *Agarwal A., Srivastava K., Puri S., Chauhan P.M.* Syntheses of 2,4,6-trisubstituted triazines as antimalarial agents//Biorganic&Medicinal Chemistry Letters 2005 V. 15(3). PP. 531–533.
25. *Енгоян А.П., МамянС.С., ГомкцянТ.А., Амбарцумян Э.Н., Ворсканян А.С., Довлатян В.В., Элиазян К.А., Пивазян В.А.* ХГС2005Т.41, № 8, СС.1236–1239.

SYNTHESIS OF NEW POTENTIALLY BIOLOGICALLY ACTIVE 2-DIMETHYLAMINO-4,6-DICHLORO-1,3,5-TRIAZINE DERIVATIVES

Zh. Azaryan

ABSTRACT

Based on 2-dimethylamino-4,6-dichloro-1,3,5-triazine methyl (4-chloro-6-(dimethylamino)-1,3,5-triazin-2-yl)glycinate was synthesized, which was subjected to further transformations. By replacing the chlorine atom in the molecule of the latter,

the corresponding quaternary ammonium salt was obtained, itsfurther interaction with potassium salts of 5-S-substituted 1,2,4-triazole derivatives and 2-aminothiazole afforded a series of of non-fused bi- and triheterocyclic systems derivatives with combination of 1,3,5-triazine ring and various azoles. Hydrazinolysis of methyl glycinate gave its hydrazide, which with various arylaldehydes formed the corresponding arylideneacetohydrazides. In the experiment the synthesized compounds showed a stimulating effect on plant growth.

Keywords: methyl (4-chloro-6-(dimethylamino)-1,3,5-triazin-2-yl)glycinate, 1,2,4-triazolyl- and 2-aminothiazolyltriazines, triazinylaminoarylideneacetohy-drazides, conformational and *Z,E*-isomerism, plant growth stimulating activity.

БИОЛОГИЯ

УДК 577.29(577.322.9)

Поступила: 17.04.2019г.
Сдана на рецензию: 25.04.2019г.
Подписана к печати: 10.12.2019г.

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АРТЕМИЗИНИНА С СЫВОРОТОЧНЫМ АЛЬБУМИНОМ ЧЕЛОВЕКА

С.В. Гиносян, О.В. Грабский, С.Г. Тирацуян

Российско-Армянский университет

siranush.ginosian@student.rau.am, hovakim.grabski@rau.am, susanna.tiratsuyan@rau.am

АННОТАЦИЯ

Артемизинины представляют собой большую группу природных и синтетических продуктов с широким спектром биологической активности, включающим антибактериальную, антиоксидантную, противовоспалительную, антиканцерогенную, иммуномодулирующую, противомикробную, антигельминтную, антивирусную, противогрибковую, антималярийную и др. Однако их фармакокинетика, фармакодинамика, точные молекулярные мишени недостаточно изучены. Данная работа посвящена исследованиям взаимодействия артемизининов с сывороточным альбумином человека. Связывание препаратов с альбумином может контролировать их распределение в тканях, оказывая значительное влияние на фармакокинетику многих лекарств. Для изучения взаимодействия веществ с альбумином

есть ряд методов, таких как флуоресцентная спектроскопия, инфракрасная спектроскопия с преобразованием Фурье, круговой дихроизм, калориметрические методы и молекулярное моделирование. Нами проведены молекулярная динамика сывороточного альбумина человека, а также кластерный и докинг анализ последнего с артемизинином. По результатам докинга потенциальными сайтами связывания артемизинина являются A субдомен II домена, B субдомен I домена и A субдомен III домена. Во всех трех сайтах артемизинин образует водородные связи с различными аминокислотами, вовлеченными во взаимодействие с лекарствами, ксеногенными факторами и т.д.

Ключевые слова: артемизинин, сывороточный альбумин человека, молекулярная динамика, кластерный анализ, докинг.

Введение

Среди различных биомакромолекул сывороточный альбумин человека (САЧ) является наиболее распространённым растворимым белком в системе кровообращения, обладающим многими физиологическими функциями. На его долю приходится примерно 60% общего белка, соответствующего концентрации 42 г/л в крови. САЧ играет роль в регулировании осмотического давления и pH, секвестрации свободных радикалов кислорода, инактивации различных токсичных липофильных метаболитов и транспорте эндогенных (жирные кислоты, гормоны, желчные кислоты, аминокислоты) и экзогенных соединений (молекулы лекарств и питательные вещества). САЧ представляет собой одноцепочечный гликозилированный полипептид, который содержит 585 аминокислот с молекулярной массой 66 500 Да. САЧ содержит 35 цистеиновых остатков, большинство из которых образуют дисульфидные мостики, которые стабилизируют третичную структуру белка, и одну свободную цистеин-производную, red-ox активную тиольную SH-группу (Cys-34), на которую приходится 80% (500 моль/л) тиолов в плазме [1, 2].

Взаимодействие между лекарственными средствами и белками плазмы очень важно для фармакокинетики и фармакодинамики лекарств. САЧ участвует в поглощении, распределении, метаболизме и экскреции препарата [2, 3].

В наших предыдущих исследованиях изучалось взаимодействие артемизинина (АРТ) с глюкокортикоидным рецептором [4–7]. Артемизинин был впервые выделен из растения *Artemisia annua* – сладкой полыни, используемой в традиционной китайской медицине. Он относится к структурно уникальному семейству триоксановых сесквитерпеновых лактонов, содержащих эндопероксидный мостик, который считается ключевым в проявлении его биологического действия [8]. Артемизинины обладают широким ассортиментом биологических активностей: антибактериальным, антиоксидантным, противовоспалительным, антиканцерогенным, иммуномодулирующим, противомикробным, антигельминтным, антивирусным, противогрибковым, антималярийным и другими. Однако фармакокинетика, фармакодинамика, точные молекулярные мишени АРТ недостаточно изучены [8,9].

Целью представленной работы было *in silico* исследование характера взаимодействия артемизинина с сывороточным альбумином человека.

Материалы и методы

3D структура САЧ в формате PDB взята из базы данных RCSB Protein Data Bank (RCSB PDB) [10]. Недостающие аминокислоты в кристаллической структуре САЧ добавлены с помощью программы Modeller [11]. Для оптимизации структуры проведена молекулярная динамика полученной структуры САЧ при помощи пакета программ GROMACS [12]. Динамику проводили с использованием силового поля Amber 99SB-ILDN [13] и водной модели TIP3P [14] при температуре 300 K, со случайным добавлением ионов Na^{-} или Cl^{+} для нейтрализации системы. Молекулярная динамика запускалась 4 раза по 400 нс. Для получения наиболее встречающейся конформации САЧ был про-

веден кластерный анализ с помощью пакета программ GROMACS методом Gromos [12]. 3D структура артемизинина была получена из базы данных PubChem [CID: 68827] [15]. Докинг анализ полученных после кластерного анализа конформации САЧ с артемизинином проводили программными пакетами AutoDockTools и AutoDockVina [16]. Анализ водородных связей и гидрофобных взаимодействий проводили с помощью Ligplot [17]. Визуализация полученных данных проводилась при помощи Pymol [18].

Результаты и обсуждение

Нами проведены молекулярная динамика и кластерный анализ структуры САЧ и получено 36 кластеров, где 1-ый кластер составлял – 43,25%, 2-ой – 14,44%, 3-ий – 13,12% и 4-ый – 10,42% от общего числа конформаций. Для каждого из этих 4 кластеров были получены центроидные структуры. Для исследования механизма взаимодействия артемизинина с центроидами четырех кластеров САЧ проводился докинг анализ.

САЧ состоит из трёх гомологичных α-спиральных доменов (I, II и III), и каждый из них подразделяется на два поддомена (А и В). Существуют два крупных и структурно селективных связывающих сайта (Drug site 1 и 2, соответственно), которые расположены в доменах IIA и IIIA [2].

Результаты докинг анализа с центроидами 1-ого кластера САЧ показали, что артемизинин взаимодействует с участком, который соответствует А субдомену II домена (Drug site 1) (Рис. 1А). Энергия связывания при этом равна -8,4 Ккал/моль. Артемизинин образует водородную связь с аргинином 218, играющим критическую роль в связывании тироксина, варфарина, билирубина и холестерола [19,20] (Рис. 1Б).

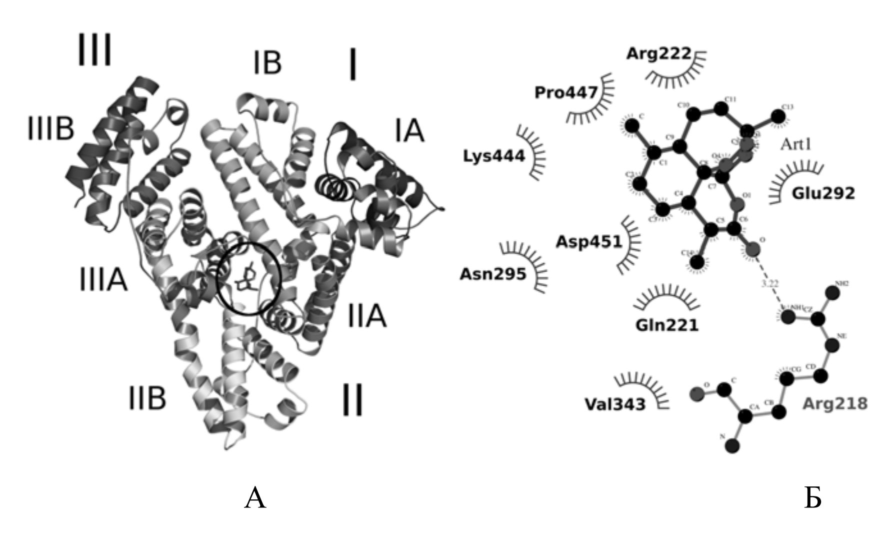


Рис. 1. А) Докинг артемизинина с центроидом 1-ого кластера САЧ. Б) Анализ гидрофобных взаимодействий и водородных связей артемизинина с центроидом 1-ого кластера САЧ.

Докинг анализ артемизинина с центроидом 2-ого кластера САЧ показал, что АРТ взаимодействует с В субдоменом I домена с энергией связывания -8,0 Ккал/моль (Рис. 2А).

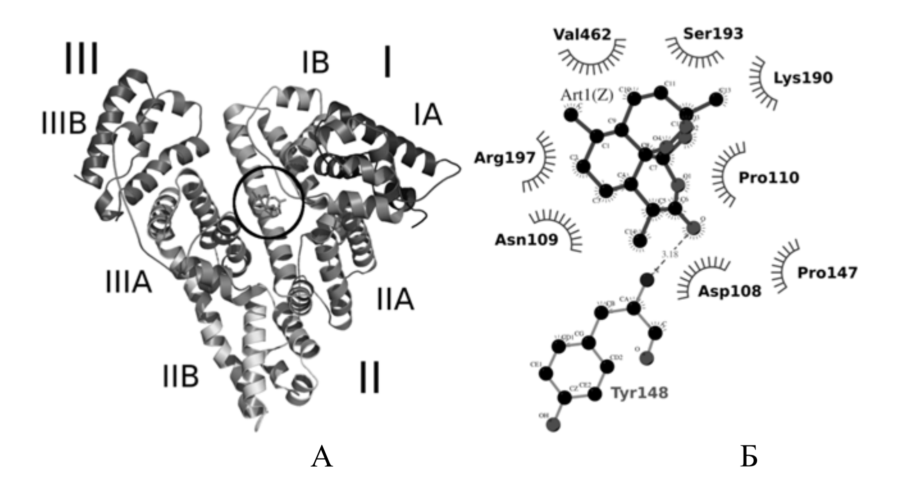


Рис. 2. А) Докинг артемизинина с центроидом 2-ого кластера САЧ. Б) Анализ гидрофобных взаимодействий и водородных связей артемизинина с центроидом 2-ого кластера САЧ.

Известно, что данный сайт ответственен за связывание с гемином, билирубином, фузидовой кислотой и лидокаином [21]. Анализ с помощью программы Ligplot показал, что АРТ образует одну водородную связь с тирозином 148 (Рис. 2Б).

Докинг анализ с центроидом 3-ого кластера САЧ показал, что АРТ взаимодействует с А субдоменом III домена с энергией связывания -8,2 Ккал/моль (Рис. 3А). С данным сайтом АРТ образует 2 водородные связи с аспарагином 391 и серином 489 (Рис. 3Б). Данный участок является Drug site 2 САЧ и ответственен за взаимодействие тироксина, ибупрофена, пропофола и т.д. [21].

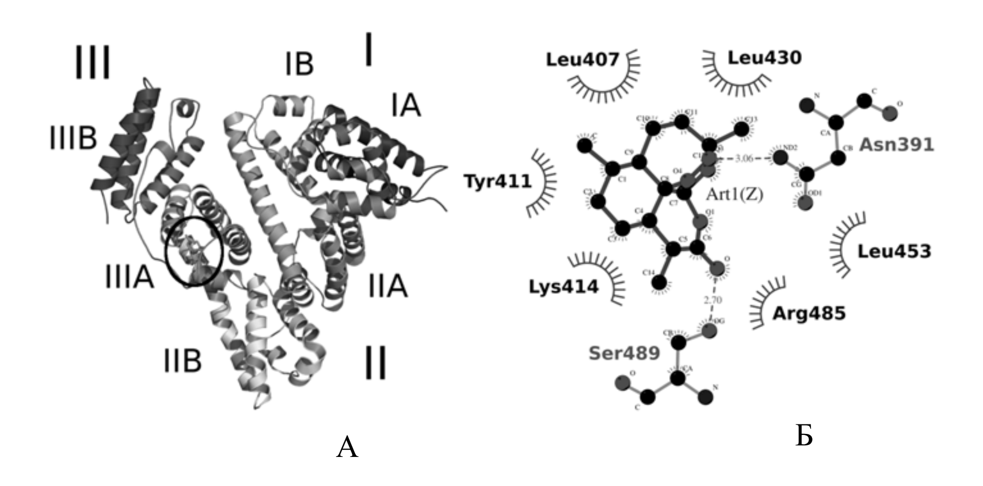


Рис. 3. А) Докинг артемизинина с центроидом 3-ого кластера САЧ. Б) Анализ гидрофобных взаимодействий и водородных связей артемизинина с центроидом 3-ого кластера САЧ.

Артемизинин взаимодействует с А субдоменом II домена центроида 4-ого кластера САЧ, как и в случае с центроидом 1-ого кластера (Рис. 4А), но с большей энергией связывания (-9,2 Ккал/моль). С данным сайтом АРТ образует множество гидрофобных взаимодействий и две водородные связи с аргинином 257, играющим критическую роль в связывании лекарственных препаратов в Drug site 1. Исследования специфичности связывания и модификации именно этого аргинина

могут быть полезны для терапевтических методов лечения, направленных на предотвращение опосредованных метилглиоксалем побочных реакций у пациентов. Так, модификации R257 и R410 связаны с ингибированием катализа простагландинов, уменьшением связывания сайт-маркера варфарина, т.е. *in vivo* связывание с R257, может иметь функциональные последствия для метаболизма простагландина и биодоступности лекарственных средств [22].

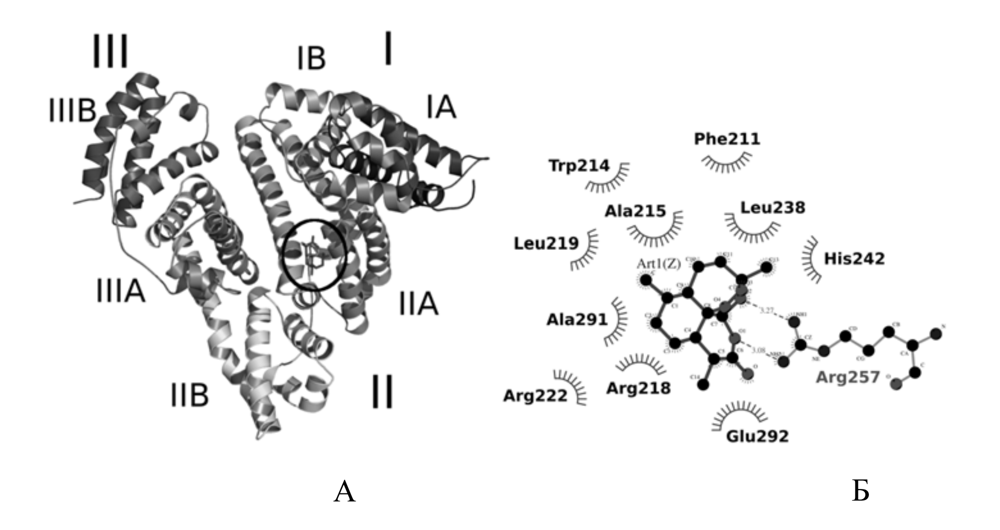


Рис. 4. А) Докинг артемизинина с центроидом 4-ого кластера САЧ. Б) Анализ гидрофобных взаимодействий и водородных связей артемизинина с центроидом 4-ого кластера САЧ.

Таким образом, нами проведены молекулярная динамика, кластерный и докинг анализ артемизинина с САЧ. По результатам *in silico* исследований получены четыре разные конформации САЧ и проведён докинг последних с АРТ. Потенциальными сайтами связывания АРТ являются А субдомен II домена, В субдомен I домена и А субдомен III домена. Во всех трех сайтах АРТ образует водородные связи с различными аминокислотами, которые в той или иной степени вовлечены во взаимодействии с лекарствами, ксеногенными факторами и т.д.

Благодарность

Работа выполнена при поддержке Гранта № 10-2/I-4 ГКН МОН РА.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Maciążek-Jurczyk M. et al.* Alteration of human serum albumin binding properties induced by modifications: A review // SpectrochimicaActa Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. 2018. Vol. 188. PP. 675–683.
2. *Fanali G. et al.* Human serum albumin: from bench to bedside // Molecular aspects of medicine. 2012. Vol. 33. № 3. PP. 209–290.
3. *Marković O.S. et al.* Human serum albumin binding of certain antimalarials //SpectrochimicaActa Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. 2018. Vol. 192. PP. 128–139.
4. *Гиносян С.В., Грабский О.В., Унанян Л.С., Тирацуян С.Г.* Исследование взаимодействия артемизинина с глюкокортикоидным рецептором методами молекулярного моделирования // Биотехнология: взгляд в будущее: Материалы III междунар. науч.-практ. конф. Ставрополь: Изд-во СтГМУ, 2017. СС. 5–9.
5. *Ginosyan S.V., Grabski H.V., Tiratsuyan S.G.* Insights on glucocorticoid receptor modulation through binding of artemisinin. BJA. 2017. Special issue, T. 1 (69). PP. 104–109.
6. *Гиносян С.В., Грабский О.В., Тирацуян С.Г., Унанян, Л.С. Вардапетян Г.Р.* Молекулярное моделирование взаимодействия и оценка моды связывания артемизинина с глюкокортикоидным рецептором // «Вестник РАУ», № 2, 2017. СС. 134–143.
7. *Гиносян С.В., Грабский О.В., Тирацуян С.Г.* Insilico-анализ взаимодействия артемизинина с глюкокортикоидным рецептором // «Физико-Химическая Биология». Материалы V Международной научной Интернет-Конференции. Ставрополь. Изд-во: СтГМУ, 2017. СС. 124–126.
8. *Dai Y.F. et al.* The pharmacological activities and mechanisms of artemisinin and its derivatives: a systematic review //Medicinal Chemistry Research. 2017. Vol. 26. № 5. PP. 867–880.
9. *Ho W.E. et al.* Artemisinins: pharmacological actions beyond anti-malarial //Pharmacology & therapeutics. 2014. Vol. 142. № 1. PP. 126–139.
10. *Berman H.M. et al.* The protein data bank // Acta Crystallographica Section D: Biological Crystallography. 2002. Vol. 58. № 6. PP. 899–907.

11. *Fiser A., Šali A.* Modeller: generation and refinement of homology-based protein structure models //Methods in enzymology. Academic Press, 2003. Vol. 374. PP. 461–491.
12. *Abraham M.J. et al.* GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers //SoftwareX. 2015. Vol. 1. PP.19–25.
13. *Lindorff, Larsen K. et al.* Improved side. Chain torsion potentials for the Amber ff99SB protein force field //Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics. 2010. V. 78. № 8. PP. 1950–1958.
14. *Jorgensen W. L. et al.* Comparison of simple potential functions for simulating liquid water //The Journal of chemical physics. 1983. Vol. 79. № 2. PP. 926–935.
15. *Bolton E.E. et al* .Pub Chem: integrated platform of small molecules and biological activities //Annual reports in computational chemistry. Elsevier, 2008. Vol. 4. PP. 217–241.
16. *Trott O., Olson A.J.* Auto Dock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading // Journal of computational chemistry. 2010. Vol. 31. № 2. PP. 455–461.
17. *Wallace A.C., Laskowski R. A., Thornton J. M.* LIGPLOT: a program to generate schematic diagrams of protein-ligand interactions // Protein engineering, design and selection. 1995. Vol. 8. № 2. PP. 127–134.
18. *De Lano W.L.* The PyMOL molecular graphics system //http://www. pymol. org. 2002.
19. *Mimoto M.S. et al.* Homozygous Mutation in Human Serum Albumin and Its Implication on Thyroid Tests // Thyroid. 2018. Vol. 28. № 6. PP. 811–814.
20. *Ha J. S. et al.* Human serum albumin and its structural variants mediate cholesterol efflux from cultured endothelial cells // Biochimicaet Biophysica Acta (BBA)-Molecular Cell Research. 2003. Vol. 1640. № 2–3. PP. 119–128.
21. *Sand K. M. K. et al.* Unraveling the interaction between FcRn and albumin: opportunities for design of albumin-based therapeutics //Frontiers in immunology. 2015.Vol. 5. P. 682.
22. *Kimzey M. J. et al.* New site(s) of methyl lyoxal-modified human serum albumin, identified by multiple reaction monitoring, alter warfarin binding and prostaglandin metabolism // Chemico-biological interactions. 2011. Vol. 192. № 1–2. PP. 122–128.

MOLECULAR MODELING OF THE INTERACTION OF ARTEMISININ WITH HUMAN SERUM ALBUMIN

S. Ginosyan, H. Grabski, S. Tiratsuyan

ABSTRACT

Artemisinins are a large group of natural and synthetic products with a wide range of biological activities, including antibacterial, antioxidant, anti-inflammatory, anti-carcinogenic, immune modulating, antimicrobial, anthelmintic, anti-viral, antifungal, anti-malarial, etc. However, the pharmacokinetics, pharmacodynamics, exact molecular targets of artemisinins are not well understood. This paper is devoted to the study of their interaction with human serum albumin. The binding of drugs to albumin can control their distribution in tissues, which can have a significant impact on the pharmacokinetics of many drugs. There are a number of methods for studying the interaction of substances with albumin, such as fluorescence spectroscopy, Fourier-transform infrared spectroscopy, circular dichroism, calorimetric methods and molecular modeling. We carried out the molecular dynamics simulation of human serum albumin, as well as cluster and docking analysis of the latter with artemisinin. According to the results of docking, potential binding sites of artemisinin are subdomain II of domain A, subdomain I of domain B, and subdomain III of domain A. In all three sites, artemisinin forms hydrogen bonds with various amino acids involved in interaction with drugs, xenogenic factors, etc.

Keywords: artemisinin, human serum albumin, molecular dynamics, cluster analysis, docking.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Азарян Ж.А.	аспирантка третьего года обучения по направлению «Химические науки»
Акопян А.Р.	студент магистратуры второго курса по направлению подготовки «Прикладная математика и информатика» РАУ
Атанесян А.А.	аспирант Института радиофизики и электроники НАН РА
Дарбинян А.А.	к.ф.-м.н., и.о.заведующего кафедрой математики и математического моделирования
Гаспарян Г.	студент четвертого курса факультета прикдадной математики и информатики ЕГУ
Гиносян С.В.	аспирантка второго года обучения по направлению «Биологические науки»
Грабский О.В.	аспирант четвертого года обучения по направлению «Биологические науки»
Леонтьев В.К.	д.ф.-м.н., профессор (ФИЦ ИУ РАН, Москва)
Матевосян Г.	аспирант второго года обучения по направлению «Прикладная математика и информатика» РАУ
Маргарян Ж.Г.	к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедры дискретной математики и теоретической информатики ЕГУ
Мовсисян Г.Л.	к.ф.-м.н. (BIT Group, Москва)
Ованисян С.	студент четвертого курса факультета прикдадной математики и информатики ЕГУ
Тирацуян С.Г.	к.б.н., доцент, доцент кафедры биоинженерии, биоинформатики и молекулярной биологии РАУ
Чубарян А.А.	д.ф.-м.н., профессор кафедры математической кибернетики РАУ, профессор кафедры дискретной математики и теоретической информатики ЕГУ

СОДЕРЖАНИЕ

Главный редактор РНИ *– М.Э. Авакян*
Корректор *– Н.И. Маргарян*
Компьютерная верстка *– А.Г. Антонян*

Адрес Редакции научных изданий
Российско-Армянского
университета:

0051, г. Ереван, ул. Овсепа Эмина, 123
тел./факс: (+374 10) 27-70-52 (внутр. 42-02)
e-mail: redaction.rau@gmail.com

Заказ № 19
Подписано к печати 25.12.2019г.
Формат 70x100$^{1}/_{16}$. Бумага офсетная № 1.
Объем 5.25 усл. п.л. Тираж 100 экз.